

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UNA LLAMA LAMINAR DIFUSA DE
METANO-AIRE**

JUAN FELIPE CORREA PUGLIESE

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERIAS FISICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA MECÁNICA
BUCARAMANGA
2014**

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UNA LLAMA LAMINAR DIFUSA DE
METANO-AIRE**

JUAN FELIPE CORREA PUGLIESE

**Trabajo de grado para optar por el título de
Ingeniero Mecánico**

**Director
JULIAN E. JARAMILLO IBARRA
PhD. Ingeniería Térmica**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERIAS FISICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA MECÁNICA
BUCARAMANGA
2014**

DEDICATORIA

A mi familia, por su infinito e incondicional apoyo, especialmente a mis padres, Raúl y Claudia por ser siempre el mejor y más claro ejemplo a seguir.

A mi hermana "cato", en agradecimiento por estar siempre adelante expandiendo mis horizontes.

A Sandra, Ingrid, Samuel y Manuel por el tiempo y las innumerables traspasadas que compartimos.

A todos mis amigos, especialmente a Yehira y a Rosita ^2.

Por último pero no menos importante, quiero dedicarle este trabajo a Adriana y a Damián, por su incesable apoyo y comprensión.

JUAN FELIPE CORREA PUGLIESE

AGRADECIMIENTOS

Al doctor Julián Ernesto Jaramillo, docente de la Escuela de Ingeniería Mecánica de la Universidad Industrial de Santander, por su colaboración, invaluable conocimiento y el apoyo brindado durante el desarrollo de este proyecto.

A la dirección de relaciones exteriores por el apoyo y la colaboración prestados durante mi experiencia de intercambio académico.

CONTENIDO

	pág
INTRODUCCIÓN	18
1.1. LA COMBUSTIÓN, UN FENÓMENO “MULTI-PHYSICS”	19
1.2. PAQUETES COMERCIALES DE SOFTWARE VS CÓDIGO “HOME-MADE”	20
1.3. MODELOS SIMPLIFICADOS	22
1.4. CONTENIDO	23
2. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN	25
2.1. TRANSPORTE POR DIFUSIÓN	27
2.2. TRANSPORTE POR CONVECCIÓN	30
2.3. PARÁMETROS ADIMENSIONALES	32
2.4. ECUACIONES DE NAVIER-STOKES	34
3. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS PARA LA DISCRETIZACIÓN DE LAS ECUACIONES DE TRANSPORTE	37
3.1. TIPOS DE MALLAS	38
3.2. DISCRETIZACIÓN DEL TÉRMINO DIFUSIVO	41
3.3. TRANSICIÓN A COORDENADAS AXISIMÉTRICAS	47
3.4. DISCRETIZACIÓN DEL TÉRMINO CONVECTIVO	48
3.5. ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN DEL TÉRMINO CONVECTIVO	50
3.6. ACOPLAMIENTO DE PRESIONES	55
3.7. RESUMEN DEL ALGORITMO SIMPLE	57
4. VALIDACIÓN DEL CÓDIGO	63
4.1. PROBLEMA LID-DRIVEN CAVITY	63
4.2. FLUJO 2D EN CANALES Y TUBERÍAS	72
5. MODELO “MIXED-IS-BURNT”	83
6. ENSAMBLE DEL MODELO	106
6.1. DISCRETIZACIÓN EN VOLÚMENES FINITOS	106
6.2. ACOPLAMIENTO DE PRESIONES	107

6.3. TRATAMIENTO DEL TÉRMINO CONVECTIVO.....	107
6.4. MALLA UTILIZADA	108
6.5. PROPIEDADES TERMO-FÍSICAS	108
6.6. MECANISMO DE REACCIÓN	108
6.7. COEFICIENTES DE DIFUSIÓN.....	109
6.8. LENGUAJE DE PROGRAMACIÓN.....	109
7. RESULTADOS DEL MODELO.....	113
8. VALIDACIÓN DEL MODELO	119
9. INTERFAZ GRÁFICA.....	144
9.1. DESCRIPCIÓN DE LAS VARIABLES.....	150
9.2. DESCRIPCIÓN DE LAS LIBRERÍAS	153
10. CONCLUSIONES.....	156
BIBLIOGRAFÍA.....	157

Lista de tablas

Pág

Tabla 1. Descripción de los términos de la ecuación general de transporte	26
Tabla 2. Ecuaciones de conservación para las cantidades escalares relevantes en la combustión.....	27
Tabla 3. Tipos de mallas comúnmente utilizados para la discretización en volúmenes finitos.	40
Tabla 4. Definición de los coeficientes para la discretización de la ecuación de difusión en coordenadas cartesianas.....	44
Tabla 5. Comparación de los coeficientes para la discretización de la ecuación de difusión en coordenadas cartesianas y axisimétricas.	48
Tabla 6. Definición de los coeficientes para flujos convectivos y difusivos	53
Tabla 7. Coeficientes de discretización para la formulación híbrida de un problema difusivo-convectivo.....	54
Tabla 8. Coeficientes de discretización para la ecuación de la presión	60
Tabla 9. Forma discreta de las condiciones de frontera para la velocidad y la presión	62
Tabla 10. Perfiles de velocidad para las líneas medias del dominio para el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, con $Re = 1000$. Reportados por Erturk et al.....	66
Tabla 11. Solución numérica de la ecuación de Blasius	76
Tabla 12. Espesor de la capa límite hidrodinámica para una placa plana.	80
Tabla 13. Espesor de la capa límite térmica para una placa plana.....	81

Tabla 14: Ecuaciones de conservación para las 5 especies mayores	87
Tabla 15. Ecuaciones de balance de especies.	92
Tabla 16. Productos de combustión en función de ϕ	96
Tabla 17. Sistema reducido de ecuaciones de conservación de especies.	101
Tabla 18. Fracciones másicas en función de la fracción de mezcla adimensional ξ	103
Tabla 19. Composición de los reactivos a la entrada de la llama	104
Tabla 20. Descripción del algoritmo de solución.	111
Tabla 21. Diseño experimental para la validación.	121
Tabla 22. Descripción de los parámetros de las llamas utilizadas para la validación.	125
Tabla 23. Descripción de los módulos de la interfaz gráfica	148

Lista de figuras

Pág

Figura 1. Perfil de velocidad para un flujo laminar entre placas planas estacionarias paralelas.	31
Figura 2. Esquema de la transformación de un dominio continuo a uno discreto. .	37
Figura 3. Esquema de una malla estructurada ortogonal en una dimensión.	41
Figura 4. Curvas de nivel (izquierda) y superficie de nivel (derecha) para la distribución de temperatura de una placa plana.	46
Figura 5. Comparación de las soluciones numérica y analítica, para la difusión de temperatura sobre una placa plana.	46
Figura 6. Esquema del mallado en coordenadas axisimétricas.	47
Figura 7. Esquema de una celda en una malla ortogonal escalonada.....	58
Figura 8. Esquema de una malla ortogonal escalonada	59
Figura 9. Esquema del problema “Lid-Driven Cavity”.	64
Figura 10. Solución del problema “Lid-Driven Cavity” para $Re = 1000$, provista por Erturk et al.....	66
Figura 11. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para la componente horizontal de la velocidad en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$	67
Figura 12. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para la componente vertical de la velocidad en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$	68

Figura 13. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para la presión hidrodinámica en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$	69
Figura 14. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para las líneas de corriente en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$	70
Figura 15. Para el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, con $Re = 1000$: Comparación de la componente horizontal de la velocidad a lo largo de la línea media vertical del dominio (izquierda). Comparación de la componente vertical de la velocidad a lo largo de la línea media horizontal del dominio (derecha).	71
Figura 16. Esquema de la capa límite hidrodinámica sobre una placa plana.	72
Figura 17. Solución de Blasius para la ecuación de la capa límite hidrodinámica. 75	
Figura 18. Interfaz gráfica para la solución de la capa límite sobre una placa plana.	77
Figura 19. Pantalla de resultados de la interfaz gráfica, para la solución de la capa límite sobre una placa plana.	78
Figura 20. Capa límite para una placa plana.	78
Figura 21. Validación del espesor de la capa límite hidrodinámica sobre una placa plana.	79
Figura 22. Validación del espesor de la capa límite térmica sobre una placa plana.	79
Figura 23. Fotografías de llamas: laminar a contracorriente (izquierda), laminar en flujo paralelo (centro) y turbulenta en flujo paralelo (derecha).	83
Figura 24. Esquema de enlaces para la combustión del metano.....	86
Figura 25. Mecanismo de reacción GRI.....	89
Figura 26. Mecanismo de reacción reducido	89

Figura 27. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la fracción de metano en los reactivos	94
Figura 28. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la fracción de metano en los reactivos.	95
Figura 29. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la relación de equivalencia.	97
Figura 30. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la relación de equivalencia.	98
Figura 31. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la fracción de mezcla ϕ	99
Figura 32. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la fracción de mezcla ϕ	99
Figura 33. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la fracción de mezcla normalizada ξ	100
Figura 34. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la fracción de mezcla normalizada ξ	100
Figura 35. Diagrama de flujo del algoritmo de solución.	112
Figura 36. Esquema de una llama laminar difusiva en flujo paralelo.	113
Figura 37. Curvas de nivel para la variable adimensional de mezcla (izquierda) y la temperatura de llama (derecha).	116
Figura 38. Perfiles radiales de concentración de cada una de las especies involucradas para diferentes alturas de la llama.	117
Figura 39. Equipos de cómputo empleados.....	122
Figura 40. Curvas de nivel de la fracción de mezcla adimensional para las llamas de validación 1 a la 8.	126

Figura 41. Curvas de nivel de la fracción de mezcla adimensional para las llamas de validación 8 a la 16.	127
Figura 42. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 1.....	128
Figura 43. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 2.....	129
Figura 44. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 3.....	130
Figura 45. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 4.....	131
Figura 46. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 5.....	132
Figura 47. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 6.....	133
Figura 48. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 7.....	134
Figura 49. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 8.....	135
Figura 50. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 9.....	136
Figura 51. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 10.....	137
Figura 52. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 11.....	138
Figura 53. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 12.....	139

Figura 54. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 13.....	140
Figura 55. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 14.....	141
Figura 56. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 15.....	142
Figura 57. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 16.....	143
Figura 58. Esquema general del código implementado	145
Figura 59. Interfaz gráfica	146
Figura 60. Interfaz gráfica de resultados.....	147

RESUMEN

TÍTULO: SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UNA LLAMA LAMINAR DIFUSA DE CH₄-AIRE¹

AUTOR: Juan Felipe Correa Pugliese²

PALABRAS CLAVE: Volúmenes finitos, flujo reactivo, simulación numérica, llama, combustión.

La dramática visibilización de los efectos del cambio climático ha despertado un creciente interés sobre el impacto de las emisiones de gases de efecto invernadero y otros gases destructores de la capa ozono, resultando en regulaciones sucesivamente más estrictas sobre la eficiencia y las emisiones de todo equipo operando con combustibles fósiles. En consecuencia, incrementar la eficiencia energética y reducir la tasa de emisiones contaminantes es hoy en día una prioridad para la industria y en ese orden de ideas, la Dinámica Computacional de Fluidos (*CFD*) se ha expandido rápidamente hasta convertirse en una herramienta indispensable, capaz de proveer información cuantitativa y cualitativa más rápido que cualquier otra técnica de experimentación. La *CFD* ha evolucionado dramáticamente junto con la velocidad de cómputo de los microprocesadores, haciendo posible la simulación de múltiples fenómenos físico-químicos acoplados como los que se presentan en la combustión de hidrocarburos.

En este trabajo se presenta un algoritmo basado en el método de los volúmenes finitos para la solución numérica de los perfiles de temperatura, presión, velocidad, densidad y concentración de las especies mayores involucradas en la combustión de metano, en una llama laminar no-premezclada en flujo paralelo. El modelo implementado es también conocido como “mixed-is-burnt” o “conserved-scalar approach”, y permite una simplificación razonable del sistema de ecuaciones diferenciales resultante, preservando los aspectos fundamentales del fenómeno a simular.

El modelo presentado en este trabajo fue validado comparando las alturas predichas numéricamente para 16 llamas con parámetros seleccionados a priori, con los resultados de una correlación teórica calibrada con parámetros experimentales provista por Roper et.al.[20,21]. Los resultados de ambos métodos concuerdan satisfactoriamente. También se comparó la temperatura promedio de cada llama con la temperatura de llama adiabática basada en la relación de equivalencia global, los resultados de ambos modelos para esta segunda validación también concuerdan satisfactoriamente.

¹Proyecto de Grado

²Facultad de Ingenierías Físico-mecánicas, Escuela de Ingeniería Mecánica, Director Julián E. Jaramillo Ibarra.

ABSTRACT

TITLE: Numerical simulation of a laminar co-flowing diffusion CH₄-AIRE flame¹

AUTHOR: Juan Felipe Correa Pugliese²

KEY WORDS: finite volume method, reactive flow, numerical simulation, co-flow flame, combustion.

The dramatic visibilization of global warming effects during the past years has awaked strong environmental concerns among people and policymakers, resulting in increasingly tighter regulations for combustion-related equipment emission and performance. In that vein, achieving higher combustion efficiencies as well as lower harmful-products emission-rates are both currently among the first priorities for research and development departments in companies worldwide. Moreover, assisting this endeavor, Computational Fluid Dynamics has become a widely accepted tool, providing for both; quantitative and qualitative data faster than any other tool or technique.

CFD has evolved dramatically over the past years along with the compute capacity of microprocessors, quickly extending its capabilities to the simultaneous solution of coupled multi-physic models in complex geometries, as those arising from the combustion of hydrocarbons.

In this work, we are implementing a finite-volume-based algorithm for the numerical solution for the field distributions of: temperature, pressure, velocity, density and major chemical-species involved in the combustion of methane in a laminar diffusion flame. The algorithm herein implemented is based on the "mixed-is-burnt" model, also known as the "conserved-scalar approach", which allows for a reasonable simplification of the resulting system of partial differential equations, still preserving the nature of the physical model.

The model presented in this work was validated by comparing the numerically predicted heights of 16 flames with carefully selected parameters, against a theoretically derived expression calibrated with experimental parameters provided by Roper et. al. [20,21]. The validations process showed good-to-excellent agreement of both methods. Moreover, the mean flame temperatures of the sample flames, as calculated from the numerical results, were compared against the adiabatic flame temperature based on the overall equivalence ratio for the flame, showing also satisfactory agreement with the numerical model.

¹ Bachelor Thesis

² College of Physical-Mechanical Engineering. School of Mechanical Engineering. Advisor Dr. Julian E. Jaramillo.

INTRODUCCIÓN

Se denomina combustión al proceso de rápida oxidación de una sustancia acompañado de una liberación de energía; ya sea en forma de luz o calor, donde la sustancia que se oxida se conoce como combustible y el agente oxidante se denomina comburente [1].

La combustión es un proceso esencial para el sostenimiento de la vida en el planeta tal como la conocemos después de la revolución industrial, donde la quema controlada de combustibles fósiles es la fuente de energía para la generación de electricidad, el transporte y la transformación de materias primas. Calderas, hornos, incineradores, motores de combustión interna, turbinas y teas son solo algunos ejemplos de los dispositivos diseñados para controlar la quema de estos combustibles, a la vez que se aprovecha de alguna manera la liberación de energía asociada con este proceso.

A pesar de los beneficios e innegables ventajas que conlleva la utilización de combustibles fósiles en procesos de combustión, esta no deja de ser una actividad inherentemente peligrosa y contaminante. La combustión de hidrocarburos es la principal fuente de gases de efecto invernadero como el dióxido de carbono (CO_2), así como de gases destructores del ozono en la atmósfera superior de la tierra, entre muchos otros; los óxidos de nitrógeno (NO_x), el monóxido de carbono (CO), los hidrocarburos no quemados (UVH) y los compuestos orgánicos volátiles (VOC). La combustión de hidrocarburos también es responsable de la emisión de abundante material particulado conocido como hollín, el cual permanece en suspensión en el aire por períodos prolongados y es responsable del denominado smog¹.

¹ Somg = Smoke + Fog.

Hoy en día, la masificación de los efectos del cambio climático junto con las crecientes preocupaciones ambientales están conduciendo al endurecimiento de las regulaciones respecto a las emisiones contaminantes y la eficiencia de los procesos de combustión. En un esfuerzo por desarrollar dispositivos en cumplimiento con las regulaciones actuales, la industria ha recurrido al uso de la simulación numérica para asistir en el proceso de investigación y desarrollo de nuevos productos, con el objetivo de mejorar el entendimiento del proceso, proporcionando información cuantitativa y cualitativa que permita optimizar el diseño de dichos dispositivos, teniendo como meta la reducciones de las emisiones contaminantes, el incremento de la eficiencia energética y la confiabilidad de los dispositivos [2].

1.1. LA COMBUSTIÓN, UN FENÓMENO “MULTI-PHYSICS”

Hoy en día la ciencia está en capacidad de generar modelos matemáticos que sobrepasan las técnicas analíticas disponibles para solucionarlos, más aún, si se consideran problemas de alta complejidad que involucran la descripción de múltiples fenómenos físico-químicos de forma simultánea. Este es el caso de la combustión, la cual es considerada un fenómeno “multiphysics” ya que involucra diversas áreas del conocimiento, entre ellas; la transferencia de calor, la transferencia de masa, la mecánica de fluidos, la cinética química y la termodinámica [19].

De forma independiente, cada uno de los fenómenos mencionados ha sido estudiado a profundidad y como resultado de estas investigaciones se han obtenido modelos matemáticos relativamente simples, que bajo ciertas condiciones y con relativa precisión describen cada uno de estos fenómenos de forma separada. Sin embargo, el desarrollo de un modelo acoplado resulta ser una tarea mucho más compleja, ya que implica ineludiblemente la conjunción de los modelos que separadamente describen cada uno de los fenómenos constituyentes, involucrando todas las restricciones propias a dichos modelos

además de aquellas que surgen debido a la combinación (usualmente no lineal) entre modelos.

Al considerar la magnitud y complejidad de un modelo como el requerido para describir el comportamiento de un flujo reactivo, en este caso en particular, una llama laminar de metano/aire; se hace evidente la incapacidad de las técnicas analíticas para proveer una solución al sistema y resulta claro porque se sugiere la implementación de esquemas numéricos para la solución de dichos modelos.

Simular el comportamiento de una llama, si bien resulta atractivo para la academia y de gran utilidad para la industria, resulta también ser un problema muy complejo y extremadamente costoso en términos computacionales. Un modelo completo corriendo en una malla adecuada puede tardar días en converger a una solución, aun utilizando algoritmos en paralelo corriendo en múltiples equipos simultáneamente.

A pesar de los avances logrados en el campo de los métodos numéricos, hoy en día la simulación numérica de flujos reactivos sigue siendo un problema sin resolver en su totalidad, es decir, no existe una metodología de solución universalmente aceptada, esto debido principalmente a la dificultad inherente a solucionar de forma simultánea un sistema no lineal de múltiples ecuaciones integro-diferenciales y algebraicas que claramente excede las técnicas analíticas disponibles, a la vez que fuerza los límites de las técnicas de aproximación numérica conocidas [16].

1.2. PAQUETES COMERCIALES DE SOFTWARE VS CÓDIGO “HOME-MADE”

Durante las últimas 2 décadas, la simulación computacional de fluidos conocida como CFD por sus siglas en inglés ha sido ampliamente utilizada en la academia y la industria durante las etapas de investigación y desarrollo de productos, especialmente desde la aparición en el mercado de paquetes comerciales y

códigos abiertos como; CFX, Flow 3-D, Abaqus, Cosmos, Comsol, y OpenFoam, entre muchos otros. Con el desarrollo de mecanismos de reacción para diferentes combustibles, la simulación computacional de fluidos no tardó mucho en extenderse a la simulación de flujos reactivos; tanto internos como externos y específicamente a la simulación de procesos de combustión.

Los paquetes comerciales de software han logrado difundir la aplicación de los métodos numéricos al proveer una interfaz amigable al usuario, permitiendo obtener y analizar resultados "rápidamente". Sin embargo, dicha interfaz gráfica también aleja al usuario de casi todos los detalles y dificultades relativas al algoritmo de solución, así como de las múltiples simplificaciones e hipótesis por las que se opta en procura de reducir la complejidad del problema y en consecuencia el tiempo de cómputo para su solución.

Los paquetes comerciales son en términos generales; herramientas más robustas y versátiles comparadas con un código "homemade", y este proyecto no pretende competir con ellos, sin embargo, la experiencia acumulada al desarrollar un código propio es claramente extrapolable a cualquier software en el mercado y puede incluso decirse que solo quien ha desarrollado un código propio, está en capacidad de entender a cabalidad y utilizar de forma eficaz los recursos que un simulador comercial pone a disposición del usuario.

Es importante recalcar que en el ámbito de la simulación numérica de flujos reactivos, ni los simuladores comerciales, ni los códigos desarrollados a nivel de laboratorio proporcionan respuestas absolutas o universalmente aceptadas. Por el contrario, ambos están sujetos a infinidad de artificios matemáticos e incluso pueden conducir a resultados que contradicen los principios básicos de conservación. En ese orden de ideas, el enfoque de una solución numérica y a la vez el problema a resolver en este proyecto, no es obtener una respuesta única ni un modelo universalmente aplicable, si no por el contrario, obtener una aproximación razonable a un problema acotado, que conserve las características principales del fenómeno físico, simplificando a la vez el algoritmo de solución

tanto como sea posible. Esto en el contexto de una llama laminar difusa de metano aire.

1.3. MODELOS SIMPLIFICADOS

La simulación numérica ha probado ser una herramienta de gran utilidad en las etapas de investigación y desarrollo de productos y por tal razón; tanto la industria como la academia requieren constantemente del desarrollo de nuevos algoritmos más robustos y rápidos, optimizados según los requerimientos específicos del “cliente”.

Optimizar implica priorizar los requerimientos específicos del problema a resolver, sacrificando todos los aspectos de menor relevancia a dicho problema en especial. No es posible optimizar todos los parámetros de forma simultánea y en términos generales, esto se reduce a la dualidad complejidad /precisión. Si bien un modelo complejo puede ser capaz de representar un fenómeno de forma muy precisa, este puede resultar muy costoso en términos de los requerimientos para su implementación; puede requerir de técnicas matemáticas complejas o ser computacionalmente muy costoso para los equipos de cómputo disponibles, incluso, puede haber dificultades para la obtención de los parámetros de entrada. La simplificación razonable y justificada de un modelo, aun cuando conlleva sacrificar cierta precisión, es una práctica común en aras de obtener resultados de forma más rápida y económica.

El desarrollo de un modelo y la implementación de un esquema numérico para su solución, aun sin contemplar el desarrollo de nuevas técnicas numéricas, resulta ser un problema bastante complejo y un proyecto de investigación per se. Esto considerando que si bien existen lineamiento que permiten especificar el algoritmo que resulta más conveniente para un problema específico, no se puede hablar de estándares ni mucho menos de soluciones absolutamente verídicas, por el contrario, se habla de soluciones aproximadas altamente dependientes de la experticia de quien las desarrolla [3].

En este trabajo de grado se presenta la solución numérica para el perfil de temperaturas, presión, velocidad, densidad y concentración de cada una de las especies mayores involucradas en la combustión del metano, en una llama laminar no-premezclada utilizando el modelo “mixed-is-burnt” también conocido como “conserved scalar approach”. El cual permite una simplificación razonable del sistema de ecuaciones diferenciales parciales resultante, preservando los aspectos fundamentales del fenómeno a simular.

1.4. CONTENIDO

Una llama laminar subsónica no es más que un flujo con propiedades físicas variables, en el cual la variación de la densidad se debe a la composición no homogénea del fluido y los gradientes de temperatura mas no a la acción de la presión. Como cualquier otro flujo con número adimensional de mach inferior a 0.3, una llama como la que se plantea en este proyecto se rige por las ecuaciones de transporte de momentum y conservación de masa, las cuales se presentan en el capítulo 2, junto con las ecuaciones de transporte para la entalpía y las especies químicas.

La solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales requiere de la utilización de alguna técnica de discretización para transformarlas en un sistema de ecuaciones algebraicas fácilmente solucionable. Para tal propósito se utilizó en este proyecto el método de los volúmenes finitos, el cual se explica brevemente en el capítulo 3.

En el capítulo 4 se presenta la validación del código desarrollado comparando las soluciones para 2 problemas estándares en la mecánica de fluidos, estos son la solución para el espesor de la capa límite sobre una placa plana y el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”. Para las capas límite hidrodinámica y térmica se compararon los resultados con la solución provista por Blasius, mientras que

para el Driven Cavity se validaron los resultados comparándolos con otro set de datos obtenido numéricamente, el cual se encuentra disponible en la literatura [7].

El modelo simplificado para la simulación de una llama laminar no-premezclada conocido como “mixed-is-burt” se presenta en el capítulo 5. Mientras que el ensamble de dicho modelo con las ecuaciones de transporte se presenta en el capítulo 6, los resultados en el capítulo 7, y la validación para el modelo se presenta en el capítulo 8. Para la validación del modelo se emplearon 16 llamas en diferentes configuraciones y para cada una de estas se comparó la temperatura de llama promedio con la temperatura de llama adiabática, y la altura visible de la llama con las alturas predichas por una correlación teórica calibrada con parámetros empíricos disponible en la literatura [20], [21].

Por último en el capítulo 9 se describe la interfaz gráfica desarrollada para presentar de forma amigable los resultados de las diferentes simulaciones desarrolladas en este proyecto.

Como anexo impreso se entrega una lista de todas las librerías desarrolladas, su función, así como sus variables de entrada y salida. La lista de todas las variables empleadas en el código incluyendo el tipo de variables y el tamaño de la misma también se entrega como anexo impreso, mientras que las librerías en Matlab se incluyen como anexos no impresos¹.

¹ En este documento, a menos que se indique lo contrario, todas las tablas y figuras fueron elaboradas por el autor.

2. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

Las ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan la transferencia de masa, momentum, energía y en términos generales cualquier cantidad escalar conservativa ϕ , son conocidas como las ecuaciones de transporte o ecuaciones de conservación en razón al principio físico invocado para su deducción. En forma vectorial y para una variable escalar genérica ϕ , la ecuación de conservación puede escribirse como;

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \bar{V} \cdot \nabla(\rho\phi\bar{V}) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (\text{Ec } 2.1)$$

Donde:

$\rho \rightarrow$ Densidad

$\phi \rightarrow$ Variable escalar

$\Gamma \rightarrow$ Coeficiente de difusión correspondiente a ϕ

$\bar{V} \rightarrow$ Campo vectorial de velocidades

$S_\phi \rightarrow$ Término fuente

$\nabla \rightarrow$ Operador gradiente o divergencia según corresponda

De izquierda a derecha el primer término de la ecuación corresponde a la variación en el tiempo de la propiedad ϕ ; el segundo término corresponde al transporte por advección; el tercero representa el transporte por difusión y el último considera cualquier tipo de fuente o sumidero para ϕ , como se muestra en Tabla 1. Nótese que la notación vectorial en términos de los operadores gradiente y divergencia utilizada en la ecuación 2.1 no está asociada a ningún sistema de coordenadas específicos.

La cantidad escalar ϕ puede sustituirse en la ecuación 2.1 por cada una de las cantidades escalares relevantes en la simulación de flujos reactivos (\bar{V}, h, Y_i, ρ), junto con los respectivos coeficientes de difusión para cada una de ellas, con el fin de obtener las ecuaciones de conservación específicas para cada cantidad escalar.

Tabla 1. Descripción de los términos de la ecuación general de transporte

Término:	Definición
Transitorio	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)$
Difusivo	$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)$
Convectivo	$\bar{V} \cdot \nabla(\rho\phi\bar{V})$
Fuente	S_ϕ

En la Tabla 2 se presentan las formas vectoriales de todas las ecuaciones de conservación relevantes a este proyecto, mientras que las formas bidimensionales en coordenadas cartesianas y cilíndricas se presentan más adelante en este trabajo en la medida en que son requeridas. Las formas tridimensionales junto con las definiciones de los operadores gradiente y divergencia en coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas pueden encontrarse en la bibliografía en múltiples referencias sobre fenómenos de transporte [5], combustión [14] y mecánica de fluidos [8].

En esta tesis no se presenta la deducción de estas ecuaciones, sin embargo el lector puede referirse a las referencias [4]–[6], [8], [14], [15], [18] para una deducción completa y detallada. Particularmente, Kuo [14], [15] presenta 3 formas distintas para derivar la ecuación de conservación de momentos analizando

respectivamente; una partícula infinitesimal, un volumen de control infinitesimal y un volumen finito de control. La misma fuente presenta también deducciones detalladas de la ecuación de conservación de energía en términos de la entalpía o de la energía interna, junto con las deducciones de las ecuaciones de conservación de especies y masa.

Tabla 2. Ecuaciones de conservación para las cantidades escalares relevantes en la combustión.

Conservación de:	Definición
Masa	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V}) = 0$
Momentum	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{V}) + \bar{V} \cdot \nabla (\rho \bar{V}) = -\nabla P + \nabla (\mu \nabla \cdot \bar{V}) + \bar{S}_v$
Entalpía	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho h) = \nabla \cdot (\rho \alpha \nabla h)$
Especies	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_i) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + w_i$

2.1. TRANSPORTE POR DIFUSIÓN

En términos generales, se denomina transporte difusivo al flujo de una determinada cantidad escalar debido a la acción de un gradiente espacial de la misma en presencia de un coeficiente de proporcionalidad. El ejemplo por excelencia del transporte por difusión pura es la transferencia de calor en sólidos descrita por la ecuación de Fourier (Ec 2.2); donde q representa el flujo de energía por unidad de área y k es la conductividad térmica del material, que matemáticamente actúa como un coeficiente de proporcionalidad entre el flujo de

energía y el gradiente de temperatura. La ecuación 2.2 no está definida en ningún sistema de coordenadas, esta puede expresarse en 1D, 2D y 3D en un sistema de coordenadas rectangulares, cilíndricas o esféricas utilizando las respectivas definiciones del operador gradiente en el sistema de coordenadas seleccionado. En el sistema internacional las unidades correspondientes a q y k son respectivamente $\left[\frac{w}{m^2}\right]$ y $\left[\frac{w}{^{\circ}C m^2}\right]$.

$$q = -k\nabla T \quad (\text{Ec } 2.2)$$

La ecuación de conservación para la energía, considerando solamente el transporte por difusión se deduce fácilmente mediante un balance energía para un volumen de control finito, donde los flujos a través de las fronteras del volumen están definidos por la ecuación de Fourier. Una deducción detallada de esta ecuación en coordenadas rectangulares, cilíndricas y esféricas puede encontrarse en la literatura en libros de transferencia de calor como Cengel [6] y Bejan [7]. Las ecuaciones 2.3 y 2.4 son respectivamente las formas transitoria y estable de la ecuación de conducción en sólidos, nótese que k y ρC_p están incluidos dentro de las derivadas espaciales y temporales, es decir son funciones del tiempo y la posición dentro del dominio y no son necesariamente constantes.

$$\nabla(k\nabla T) + \dot{q} = \frac{d(\rho C_p T)}{dt} \quad (\text{Ec } 2.3)$$

$$\nabla(k\nabla T) + \dot{q} = 0 \quad (\text{Ec } 2.4)$$

Las ecuaciones 2.3 y 2.4 pueden simplificarse a su forma más común si se considera que todas las propiedades son aproximadamente constantes en todo el dominio, caso específico en el cual es posible extraer k y ρC_p de las derivadas parciales que los contienen y expresar la ecuación en términos de la difusividad térmica $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$ y el operador laplaciano $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2$, como se muestra en las ecuaciones 2.5, 2.6 y 2.7.

$$\nabla^2 T + \frac{\dot{q}}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{dT}{dt} \quad (\text{Ec } 2.5)$$

$$\nabla^2 T = \Delta T = -\frac{\dot{q}}{k} \quad (\text{Ec } 2.6)$$

$$\nabla^2 T = \Delta T = 0 \quad (\text{Ec } 2.7)$$

El objetivo de simplificar las ecuaciones 2.3 y 2.4 en 2.5 y 2.6 no es otro que el de facilitar su solución. Mientras que para las primeras 2 no existe solución analítica alguna; las 2 últimas pueden ser solucionadas utilizando el método de separación de variables.

Más allá del significado físico de la ecuación 2.6, también conocida como la ecuación de Poisson, esta tiene gran importancia para la matemática ya que es una de las pocas ecuaciones diferenciales parciales con una solución analítica plenamente establecida. La forma homogénea de la ecuación 2.6 que se muestra en la ecuación 2.7 es conocida como la ecuación de Laplace. Tanto la ecuación de Laplace como la de Fourier son de tipo elíptico y su solución ha sido ampliamente descrita en la literatura [9].

Además del transporte de energía debido a un gradiente de temperatura, el transporte por difusión se puede observar en la transferencia de momentum debido a un gradiente de velocidad y en la dispersión de una especie en una mezcla de gases debida a la acción de un gradiente de concentración. Respectivamente representadas por: la ley de Fourier, la ecuación del momento cortante y la ley de Fick, cuyas formas unidimensionales se muestran en las ecuaciones 2.8, 2.9 y 2.10. Los coeficientes de proporcionalidad en dichas ecuaciones son respectivamente: la conductividad térmica, la viscosidad y el coeficiente binario de difusión de masa.

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad (\text{Ec } 2.8)$$

$$\tau = -\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (\text{Ec } 2.9)$$

$$j = -D \frac{\partial X_i}{\partial x} \quad (\text{Ec } 2.10)$$

Es importante anotar que los sólidos no son transportados por gradientes de concentración, por lo cual la ley de Fick solo es aplicable a fluidos. Esto no presenta ningún inconveniente para este trabajo puesto que tanto los reactivos como los productos de combustión serán considerados gases ideales. También es importante recalcar el carácter newtoniano de todos los fluidos considerados en este proyecto, puesto que esta hipótesis permite expresar el tensor de esfuerzos del fluido en términos de la viscosidad y el gradiente de velocidad de forma simple y fácilmente manejable durante la discretización en volúmenes finitos que se presentará más adelante.

2.2. TRANSPORTE POR CONVECCIÓN

El transporte por convección es aquel que ocurre debido a la acción de un campo de flujo \bar{v} . Un ejemplo claro de transporte netamente convectivo es el que experimentaríamos una partícula "ideal" (sin peso), la cual al ser liberada en la corriente de un río, será transportada por el flujo de agua siguiendo la trayectoria de las líneas de corriente sin que se presente efecto de difusión alguno debido a la interacción con otras partículas similares. Este tipo de transporte debido únicamente al campo de flujo es denominado advectivo, aunque comúnmente al término que representa el flujo advectivo en las ecuaciones de transporte/conservación se le denomina término convectivo [23].

El número de Reynolds es un parámetro adimensional que cuantifica la magnitud de las fuerzas de inercia de un flujo respecto a las fuerzas viscosas. Un número de Reynolds alto está asociado a valores altos de velocidad, densidad y longitud característica mientras que un número de Reynolds bajo está asociado a una alta

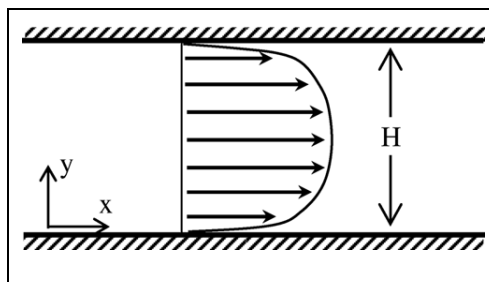
viscosidad. El número de Reynolds puede entenderse también como un indicador de la magnitud del transporte de momentum por convección relativo a la magnitud del transporte de momentum por difusión, donde un número de Reynolds alto implica que el transporte de momentum es debido principalmente a fuerzas convectivas mientras que un número bajo de Reynolds implica que el mecanismo de transporte de momentum es principalmente la difusión.

$$Re = \frac{\text{transporte de momentum por convección}}{\text{transporte de momentum por difusión}} = \frac{\rho V L}{\mu} \quad (\text{Ec } 2.11)$$

Para un flujo incompresible entre dos placas planas estacionarias como se muestra en la Figura 1, la ecuación de transporte de momentum puede simplificarse y expresarse de forma adimensional como se muestra en la ecuación 2.12. Esta ecuación no es otra que la forma adimensional de las ecuaciones de Navier-Stokes en coordenadas cartesianas.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (\text{Ec } 2.12)$$

Figura 1. Perfil de velocidad para un flujo laminar entre placas planas estacionarias paralelas.



Fuente. Internet.

El caso específico en donde las fuerzas de inercia son mucho mayores que las fuerzas viscosas, es decir, el recíproco del número de Reynolds basado en la

separación entre placas se aproxima a cero cancelando el término viscoso que acompaña, se conoce como flujo inviscido o flujo con viscosidad cero.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{Ec } 2.13)$$

Este tipo de flujo también se conoce como flujo potencial, y es un claro ejemplo de transporte convectivo puro, ya que al despreciar los efectos viscosos el único mecanismo de transporte de momentum en la dirección x es la advección.

2.3. PARÁMETROS ADIMENSIONALES

Diferentes fenómenos físicos tienen diferentes escalas de acción; temporales y espaciales, y su estudio se facilita al utilizar cantidades adimensionales. Los parámetros adimensionales más comúnmente utilizados en combustión son los números de Prandtl (Ec 2.14), Schmidt (Ec 2.15) y Lewis (Ec 2.16).

$$Pr = \frac{\text{Transporte de momentum por difusión}}{\text{Transporte de entalpia por difusión}} = \frac{\nu}{\alpha} \quad (\text{Ec } 2.14)$$

$$Sc = \frac{\text{Transporte de momentum por difusión}}{\text{Transporte de masa por difusión}} = \frac{\nu}{D} \quad (\text{Ec } 2.15)$$

$$Le = \frac{\text{Transporte de entalpia por difusión}}{\text{Transporte de masa por difusión}} = \frac{\alpha}{D} \quad (\text{Ec } 2.16)$$

De forma similar al número de Reynolds para el momentum, es posible establecer relaciones entre el transporte de una cantidad debido a efectos convectivos y el transporte de la misma debido a efectos difusivos, este es el caso del número adimensional de Peclet. El número de Peclet tiene múltiples definiciones dependiendo de la propiedad a la que se aplique. En las ecuaciones 2.17 y 2.18 se muestran las definiciones del número de Peclet para el transporte de energía y de especies respectivamente.

$$Pe_h = \frac{L * V}{\alpha} = Re * Pr \quad (\text{Ec } 2.17)$$

$$Pe_D = \frac{L * V}{D} = Re * Sc \quad (\text{Ec } 2.18)$$

El número de Peclet se puede definir numéricamente para cada cantidad escalar basándose en los coeficientes que acompañan a la ecuación de transporte para dicha cantidad, como se muestra en la ecuación 2.22.

$$Pe = \frac{F}{D} \quad (\text{Ec } 2.19)$$

$$F = \rho u \quad (\text{Ec } 2.20)$$

$$D = \frac{\Gamma}{\Delta x} \quad (\text{Ec } 2.21)$$

Donde u y Δx son respectivamente una velocidad y una longitud característica para el fluido, mientras que Γ es el respectivo coeficiente de difusión para la cantidad escalar en cuestión y ρ es la densidad del fluido.

Usualmente el número de Peclet se calcula para cada celda del dominio de forma individual, de forma que ρ, u, Γ y Δx toman los valores correspondientes para cada celda. Por simple inspección puede notarse que cuando la cantidad escalar considerada es el momentum en la dirección x , $\frac{F}{D} = \frac{\rho u \Delta x}{\mu} = Re$, que es equivalente al número de Reynolds con una longitud característica basada en el tamaño del volumen de control.

Para el desarrollo de este proyecto son de especial importancia los números adimensionales de Lewis y de Peclet en sus 2 definiciones, al igual que el número de Reynolds. En este proyecto no se incluye ningún modelo de turbulencia por lo tanto el número de Reynolds en base al diámetro de la llama debe mantenerse siempre por debajo de 2300. Por otro lado, la estabilidad del esquema numérico

está directamente relacionada con los números de Peclet donde la longitud característica es sustituida por las dimensiones del volumen de control (ΔX o ΔY), estos parámetros son constantemente monitoreados ya que la convergencia del algoritmo recae en la estabilidad de la ecuación discretizada. Por último pero no menos importante, el número de Lewis es la principal hipótesis del modelo mixed-is-burnt para la simplificación del sistema de ecuaciones. El número de Lewis como se explicará más adelante asume un valor unitario lo que permite expresar los coeficientes de difusión de masa en función de la difusividad térmica.

2.4. ECUACIONES DE NAVIER-STOKES

Las ecuaciones de Navier-Stokes reciben su nombre de Claude-Louis Navier y George Gabriel Stokes [8]. Se trata de un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento de un fluido. Estas ecuaciones gobiernan la atmósfera terrestre, las corrientes oceánicas y el flujo alrededor de vehículos o proyectiles, al igual que los flujos internos en tuberías, canales o turbinas. En general, cualquier fenómeno en el que se involucren fluidos newtonianos.

Estas ecuaciones se obtienen aplicando los principios de conservación de la mecánica y la termodinámica a un volumen fluido. Haciendo esto se obtiene la llamada formulación integral de las ecuaciones. Para llegar a su formulación diferencial se manipulan aplicando ciertas consideraciones, principalmente aquella en la que los esfuerzos tangenciales guardan una relación lineal con el gradiente de velocidad (ley de viscosidad de Newton), obteniendo de esta manera la formulación diferencial que generalmente es más útil para la resolución de los problemas que se plantean en la mecánica de fluidos computacional.

En la actualidad no se dispone de una solución general para este conjunto de ecuaciones, y salvo ciertos tipos de flujo y situaciones muy concretas no es posible hallar una solución analítica; por lo que en muchas ocasiones es preciso

recurrir al análisis numérico para determinar una solución aproximada. A la rama de la mecánica de fluidos que se ocupa de la obtención de estas soluciones mediante métodos numéricos se le denomina dinámica de fluidos computacional (CFD, de su acrónimo anglosajón Computational Fluid Dynamics).

Las ecuaciones de Navier-Stokes para la conservación de masa y momentum en coordenadas cartesianas 2D cuando se considera un flujo incompresible (densidad constante) con viscosidad constante, se muestran a continuación:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{Ec } 2.22)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + S_{M_x} \quad (\text{Ec } 2.23)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + S_{M_y} \quad (\text{Ec } 2.24)$$

Donde las longitudes x y y han sido normalizadas respecto a una longitud característica del problema, al igual que las velocidades u y v , las cuales han sido normalizadas respecto a alguna velocidad de referencia. La presión p también ha sido normalizada respecto al producto ρU^2 .

Infortunadamente, la forma simplificada de las ecuaciones de transporte no admite la simulación de flujos reactivos o flujos compresibles, ya que no contempla variación alguna; espacial o temporal, en la densidad del fluido o sus propiedades. Considerando la viscosidad y la densidad como variables, la forma vectorial para cualquier sistema de coordenadas (cartesianas, cilíndricas o esféricas) de la ecuación de conservación de los momentos puede escribirse como;

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{V}) + \bar{V} \cdot \nabla(\rho \bar{V}) = -\nabla P + \nabla(\mu \nabla \cdot \bar{V}) + \bar{S}_v \quad (\text{Ec } 2.25)$$

Mientras que la ecuación de conservación de masa bajo las mismas condiciones puede escribirse como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (\text{Ec } 2.26)$$

A pesar de que la formulación vectorial es compacta, numéricamente puede resultar más complicado trabajar con ella y por tal razón se presenta a continuación la forma cartesiana de la ecuación de conservación de momentum en 2D, junto con la ecuación de conservación de masa para el mismo caso. Dichas ecuaciones se emplearan en el siguiente capítulo para la solución del Driven Cavity Problem.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) + S_{M_x} \quad (\text{Ec } 2.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right) + S_{M_y} \quad (\text{Ec } 2.28)$$

Y para la ecuación de conservación de masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{Ec } 2.29)$$

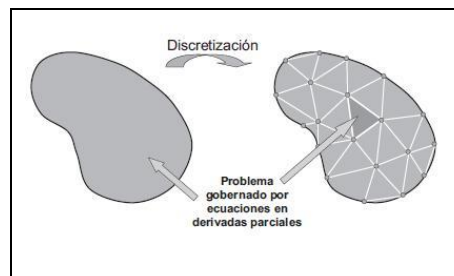
Nótese que en las ecuaciones 2.27-2.29 a diferencia de las ecuaciones 2.22-2.24, ρ y μ se mantienen dentro de las derivadas parciales, es decir, la densidad $\rho(x, y, t)$ y la viscosidad $\mu(x, y, t)$ no son constantes, por el contrario dependen de la temperatura, la presión y la composición del fluido en cada volumen de control y por lo tanto son funciones en el tiempo y el espacio.

3. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS PARA LA DISCRETIZACIÓN DE LAS ECUACIONES DE TRANSPORTE

El conjunto de ecuaciones diferenciales parciales y ecuaciones algebraicas que modelan el comportamiento de un flujo laminar reactivo resulta ser un sistema de muy alta complejidad debido al gran número de ecuaciones involucradas, al fuerte acoplamiento que existe entre las mismas y a la disparidad en las escalas de tiempo características de cada fenómeno. Partiendo de que una solución analítica es a todas luces inaplicable, el enfoque de este capítulo es describir el método conocido como “Volúmenes Finitos” utilizado para la discretización y linealización del sistema de ecuaciones, junto con el algoritmo SIMPLE “Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations” [17], que posibilita una aproximación numérica secuencial o iterativa a la solución del sistema.

Discretizar una ecuación diferencial significa transformarla de un dominio continuo donde cada variable está definida en infinitos puntos dentro una frontera, a un dominio discreto donde la función existe solo en un conjunto de locaciones predefinidas denominado malla. Para tal propósito existen principalmente 3 métodos, estos son: las diferencias finitas, los volúmenes finitos y los elementos finitos.

Figura 2. Esquema de la transformación de un dominio continuo a uno discreto.



Fuente. Internet.

Las diferencias finitas son el método de discretización más antiguo de los 3, resulta ser bastante sencillo en concepto ya que se basa en aproximar de forma discreta las derivadas sin requerir mayores cambios a la ecuación, cabe anotar que las diferencias finitas son la base del cálculo diferencial. Las diferencias finitas no son un método conservativo ya que la ecuación discretizada solo representa la ecuación original en la medida en que el espaciamiento entre nodos tiende a cero [23]. Vale la pena mencionar que la implementación de un código basado en diferencias finitas es bastante sencilla en comparación con los demás métodos.

Por otro lado, los elementos finitos se basan en fraccionar el dominio en pequeños volúmenes o celdas, al interior de los cuales la ecuación diferencial es representada mediante la utilización de las denominadas “shape functions”. Este método admite fácilmente la utilización de mallas no estructuradas para replicar dominios complejos, sin embargo, no es necesariamente un esquema conservativo y esta propiedad depende fuertemente de las condiciones de cada problema, es decir, no es una formulación del todo robusta [18]. Una formulación basada en elementos finitos para un problema de flujo de fluidos no es fácil de implementar comparada con esquemas en diferencias finitas o volúmenes finitos.

Por último, el método de los volúmenes finitos se basa en integrar la ecuación diferencial sobre el volumen de control y es la técnica de discretización por excelencia para problema de flujo de fluidos. A diferencia de los esquemas en diferencias y elementos finitos, los volúmenes finitos son una formulación robusta y conservativa sin importar el tipo y la densidad de malla utilizada. Puede decirse que la discretización en volúmenes finitos tiene el sentido “físico” del que carecen las diferencias y los elementos finitos.

3.1. TIPOS DE MALLAS

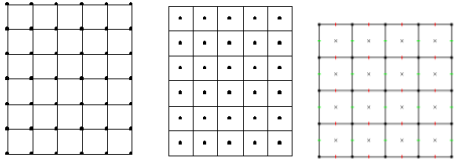
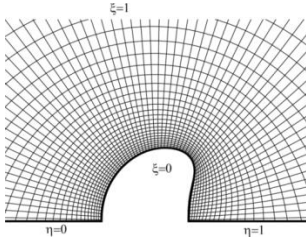
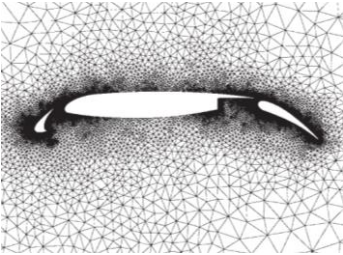
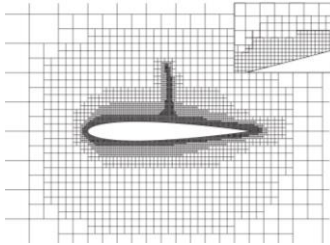
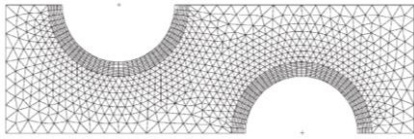
Idealmente, un problema de dinámica de fluidos o transferencia de calor, al ser fenómenos gobernados por modelos determinísticos, debería admitir no más que

una única solución, que debe ser independiente del mallado, las condiciones iniciales o de frontera, los parámetros de relajación o el tamaño del step-time utilizados. Sin embargo, tal comportamiento es difícilmente apreciable ya que todos estos factores inducen de una forma u otra “errores” en la solución, haciendo que esta sea una representación no solo de la ecuación a resolver si no también de las falencias del esquema utilizado. En resumen, diferentes esquemas o parámetros utilizados por el algoritmo de solución pueden conducir a soluciones sustancialmente divergentes para un mismo problema. En este orden de ideas, la escogencia de una malla no es una decisión fácil puesto que de ella depende en gran medida la validez de los resultados obtenidos.

Existe diversas técnicas de mallado y la adecuada selección de una malla en particular depende de múltiples factores, como; la complejidad del dominio a representar, la necesidad de refinar la malla en los punto donde la solución presenta gradientes significativos, la facilidad para discretizar los operadores matemáticos como el gradiente y el laplaciano, la necesidad de implementar un esquema de interpolación, la sensibilidad a la aparición de “spurious oscillations”¹ debidas a problemas de desacoplamiento entre las formas discretas de las ecuaciones de momento y de continuidad, entre muchos otros factores. Un breve resumen de las ventajas y desventajas de los principales métodos de mallado se presenta a continuación para propósitos informativos.

¹ Tipo de error encontrado en la solución de una ecuación diferencial por métodos numéricos. Se trata de oscilaciones numéricas en el dominio espacial, que a pesar de ser una solución correcta para la ecuación discretizada, no son una solución para la ecuación diferencial original.

Tabla 3. Tipos de mallas comúnmente utilizados para la discretización en volúmenes finitos.

TIPO DE MALLA	ESQUEMA	DESCRIPCIÓN
Malla ortogonal cartesiana		Es la forma más simple de mallado, su implementación no requiere de esquemas de interpolación ni definiciones especiales de los operadores matemáticos.
Malla estructurada refinada localmente		Permite capturar geometrías curvilíneas, preservando la ortogonalidad de la malla, por lo que no se requieren definiciones especiales de los operadores matemáticos.
Malla no estructurada de elementos triangulares		Permite capturar formas extremadamente complejas, sin embargo requiere redefinir los operadores matemáticos e implementar esquemas de interpolación apropiados.
Malla estructurada refinada localmente		Permite refinar la malla en lugares específicos sin mayores modificaciones a los operadores matemáticos. Cuando la geometría no es excesivamente curvilínea resulta ser el mejor esquema considerando el Costo-Beneficio de su implementación.
Malla no estructurada con elementos mixtos		Permite un mallado preciso ideal para formas muy complejas, sin embargo su implementación es significativamente más compleja que todas las demás mallas.

3.2. DISCRETIZACIÓN DEL TÉRMINO DIFUSIVO

La discretización en volúmenes finitos puede entenderse más fácilmente separando y trabajando de forma individual con cada uno de los términos de la ecuación general de transporte, empezando por el término difusivo que como se explicó en el capítulo 2, es la misma ecuación de conducción de calor en sólidos.

$$\nabla(k\nabla\phi) = 0 \quad (\text{Ec } 3.1)$$

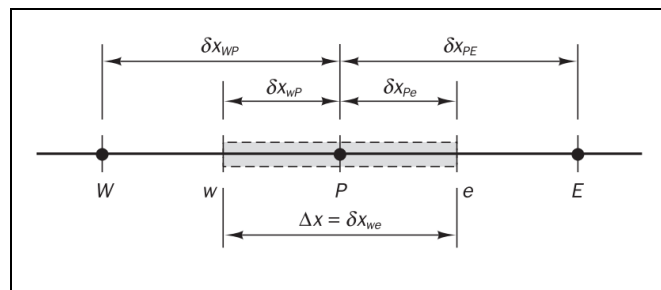
Tanto en coordenadas cartesianas como en coordenadas cilíndricas 2D; el operador gradiente se define como se muestra en la ecuación 3.2, mientras que la ecuación 3.1 puede expresarse en 1D como la ecuación 3.3:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}i + \frac{\partial}{\partial y}j, \quad \nabla = \frac{\partial}{\partial r}i + \frac{\partial}{\partial z}j, \quad (\text{Ec } 3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = 0 \quad (\text{Ec } 3.3)$$

Para la discretización de la ecuación de conducción se utilizó en este trabajo una malla ortogonal, ya sea en coordenadas cartesianas o en coordenadas cilíndricas 2D. En dicha malla, los valores son almacenados en nodos ubicados en el centro del volumen de control, como se muestra en la Figura 3.

Figura 3. Esquema de una malla estructurada ortogonal en una dimensión.



Fuente: [23]

Al integrar la ecuación 3.3 en el volumen de control mostrado se obtiene la ecuación 3.4, donde los subíndices e y w representan las fronteras derechas e izquierda del volumen de control.

$$\int_v \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dv = \left(A\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(A\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = 0 \quad (\text{Ec } 3.4)$$

Es común que los valores de Γ se almacenen en los mismo nodos dónde se ha discretizado ϕ , es decir, en el centro del volumen de control. Sin embargo, la ecuación 3.4 requiere calcular los valores de Γ en las fronteras del volumen de control, denominadas Γ_e y Γ_w para la frontera derecha e izquierda respectivamente. Para tal fin se debe utilizar un esquema de interpolación, en este caso por simplicidad se ha utilizado un esquema lineal que resulta equivalente al promedio de Γ_E y Γ_P para Γ_e , mientras que para Γ_w es equivalente al promedio entre Γ_W y Γ_P , cuando $\delta x_{wP} = \delta x_{Pe}$.

$$\Gamma_e = \frac{\Gamma_E + \Gamma_P}{2} \quad (\text{Ec } 3.5)$$

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2} \quad (\text{Ec } 3.6)$$

Sustituyendo en las derivadas correspondientes en la ecuación 3.4 con aproximaciones centradas de segundo orden:

$$\left(A\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) \quad (\text{Ec } 3.7)$$

$$\left(A\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \quad (\text{Ec } 3.8)$$

Resolviendo la integral sobre el volumen de control y reagrupando los términos se obtiene la ecuación 3.10.

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) = 0 \quad (\text{Ec } 3.9)$$

$$\left(\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x} + \frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x} \right) \phi_P = \left(\frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x} \right) \phi_E + \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x} \right) \phi_W \quad (\text{Ec } 3.10)$$

Cuando se considera una malla cartesiana se hace evidente que las áreas en ambas caras del volumen de control son iguales ($A_e = A_w$), y si bien simplificarlas es posible, es más conveniente mantenerlas como 2 términos diferentes con el fin de facilitar la transición al sistema de coordenadas cilíndricas 2D que será utilizado más adelante.

Para la ecuación 3.10 es posible establecer 3 coeficientes, uno para cada celda involucrada en el esquema, los cuales se muestran en las ecuaciones 3.11, 3.12 y 3.13 para las celdas; izquierda, derecha y central respectivamente. Al sustituir dichos coeficientes en la ecuación 3.10 se obtiene la forma discreta de la ecuación de difusión, la cual se muestra en la ecuación 3.14.

$$a_W = \frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x} \quad (\text{Ec } 3.11)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x} \quad (\text{Ec } 3.12)$$

$$a_P = a_W + a_E \quad (\text{Ec } 3.13)$$

La ecuación 3.14 es una ecuación algebraica lineal que involucra 3 incógnitas, una para cada celda involucrada en el esquema. El subíndice nb en la sumatoria hace referencia a todas las celdas vecinas a la celda denominada P y hace evidente el concepto de difusión; donde cada celda o nodo es afectado únicamente por las celdas o nodos circundantes. En un problema de difusión utilizando aproximaciones de segundo orden para las derivadas parciales; la “información” se transmite una celda a la vez en cada dirección de la malla por cada iteración realizada.

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W = \sum_{nb} a_i \phi_i \quad (\text{Ec } 3.14)$$

Bajo el mismo esquema aquí descrito para el caso unidimensional, es posible definir los coeficientes para un problema multidimensional en 2D o 3D, en el caso 2D se utilizarían 5 coeficientes mientras que en el caso 3D serían 7 como se muestra en la Tabla 4.

Tabla 4. Definición de los coeficientes para la discretización de la ecuación de difusión en coordenadas cartesianas.

	Center	Este	Oeste	Norte	Sur	Inferior	Superior
	a_P	a_E	a_W	a_N	a_S	a_B	a_T
1D	$a_E + a_W$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x}$	$\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x}$	-	-	-	-
2D	$a_E + a_W + a_N + a_S$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x}$	$\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x}$	$\frac{\Gamma_n A_n}{\Delta y}$	$\frac{\Gamma_s A_s}{\Delta y}$	-	-
3D	$a_E + a_W + a_N + a_S + a_B + a_T$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x}$	$\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x}$	$\frac{\Gamma_n A_n}{\Delta y}$	$\frac{\Gamma_s A_s}{\Delta y}$	$\frac{\Gamma_b A_b}{\Delta z}$	$\frac{\Gamma_t A_t}{\Delta z}$

Como se mencionó antes, la solución analítica multidimensional de la ecuación de transferencia de calor por conducción en un sólido requiere de múltiples simplificaciones, las cuales en muchos casos corrompen el modelo e impiden representar correctamente el fenómeno deseado. Con el propósito de mostrar como una adecuada solución numérica puede sustituir a una solución analítica, a continuación se comparan las soluciones obtenidas para la ecuación 3.1 mediante los métodos de separación de variables en el caso analítico y mediante una

discretización basada en volúmenes finitos para el caso numérico. El dominio para este problema consiste de una placa plana de dimensiones 1x1 [m], cuyos bordes inferior, izquierdo y derecho están sometidos a una temperatura constante de 0°C, mientras que la pared superior está sometida a una temperatura constante de 1 °C.

El campo de temperaturas provisto por la solución analítica en la ecuación 3.15 es una expansión en funciones ortogonales \sin y \sinh , comúnmente conocida como una serie de Fourier. Cabe resaltar que como cualquier serie infinita convergente, la precisión con la que representa la función sujeta a la expansión depende del número de términos n considerados en la sumatoria, para este ejemplo se consideraron los primeros 200 eigenvalores. Puesto que el enfoque de este trabajo son las soluciones numéricas, esta solución analítica solo se presenta con propósitos ilustrativos y no se brindan mayores detalles acerca de la derivación de las soluciones analíticas, sin embargo, el lector puede referirse a [9], [10] para más información acerca del método de separación de variables para la solución de ecuaciones diferenciales parciales lineales de segundo orden. El código para obtener y graficar la solución analítica para el perfil bidimensional de temperaturas se presenta como anexo no impreso. En la Figura 4 se presenta el perfil de temperaturas resultante de la solución analítica, utilizando curvas de nivel (izquierda) y una superficie 3D (derecha).

$$T_{x,y} = \sum_{n=1}^{\alpha} \frac{\left(\frac{2}{n\pi}\right) [1 - (-1)^n] T_s}{\sinh\left(\frac{n\pi b}{2}\right)} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh\left(\frac{n\pi y}{a}\right) \quad (\text{Ec } 3.15)$$

Una comparación de la soluciones se presenta en la Figura 5. El perfil de temperaturas obtenido de forma analítica se graficó en la parte izquierda mientras que la solución numérica se muestra a la derecha. Es claro como las 2 soluciones coinciden en todo el dominio a excepción de la cara superior donde las series convergentes proporcionan una solución oscilatoria, la cual se muestra como una línea punteada.

Figura 4. Curvas de nivel (izquierda) y superficie de nivel (derecha) para la distribución de temperatura de una placa plana.

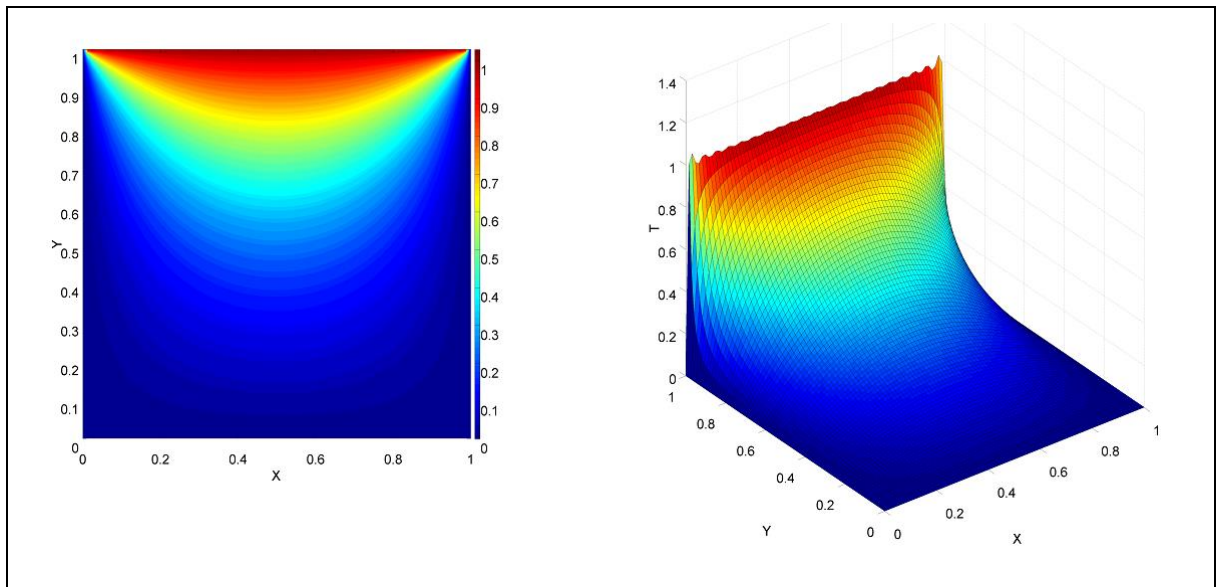
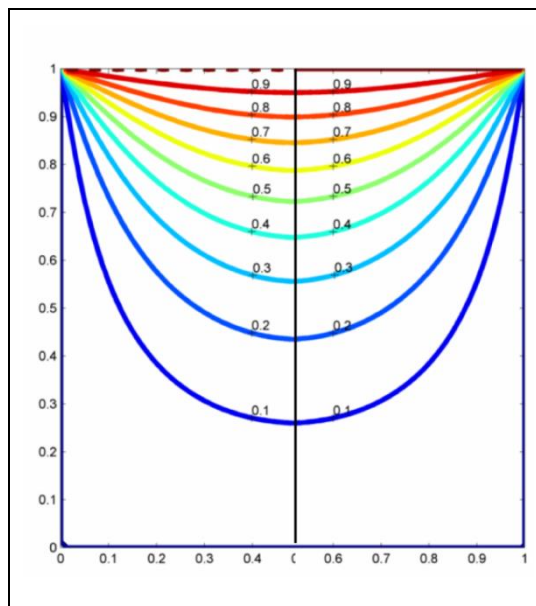


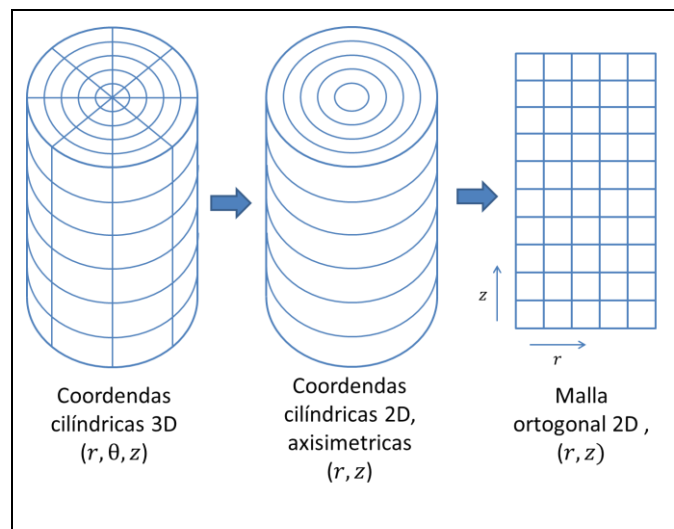
Figura 5. Comparación de las soluciones numérica y analítica, para la difusión de temperatura sobre una placa plana.



3.3. TRANSICIÓN A COORDENADAS AXISIMÉTRICAS

Para un problema netamente difusivo como el representado por la ecuación 3.1, la transición a coordenadas cilíndricas 2D en (r, z) , también conocidas como coordenadas axisimétricas es sorprendentemente simple ya que las ecuaciones guardan la misma forma que la ecuación en coordenadas cartesianas, obviando el hecho de que mientras la ecuación en coordenadas cartesianas puede resultar en coeficientes constantes en tiempo y espacio, los coeficientes en el caso axisimétrico son siempre variables espacialmente. En la Figura 6 se presenta un esquema de la transformación de un dominio físico tridimensional en coordenadas cilíndricas, a un dominio computacional asumiendo simetría axial.

Figura 6. Esquema del mallado en coordenadas axisimétricas.



La forma discreta de la ecuación 3.1 en coordenadas cilíndricas 1D y 2D sigue siendo representada por la ecuación 3.14 y los coeficientes presentados en la Tabla 4 son aplicables para el caso axisimétrico, el único cambio requerido es una nueva definición para las áreas de las caras del volumen de control. Una comparación en los coeficientes para el caso axisimétrico y el caso cartesiano 2D se presenta en la Tabla 5.

Tabla 5. Comparación de los coeficientes para la discretización de la ecuación de difusión en coordenadas cartesianas y axisimétricas.

Coordenadas	Este	Oeste	Norte	Sur	Inferior	Superior
Cartesianas						
$\Delta x, \Delta y, \Delta z =$ <i>constantes</i>	$\frac{(\Delta y * \Delta z)\Gamma_e}{\Delta x}$	$\frac{(\Delta y * \Delta z)\Gamma_w}{\Delta x}$	$\frac{(\Delta x * \Delta z)\Gamma_n}{\Delta y}$	$\frac{(\Delta x * \Delta z)\Gamma_s}{\Delta y}$	$\frac{(\Delta x * \Delta y)\Gamma_b}{\Delta z}$	$\frac{(\Delta x * \Delta y)\Gamma_t}{\Delta z}$
Axisimétricas	-	-	$\frac{(2\pi r_n)\Gamma_n}{\Delta x}$	$\frac{(2\pi r_s)\Gamma_s}{\Delta x}$	$\frac{\pi(r_n^2 - r_s^2)\Gamma_b}{\Delta y}$	$\frac{\pi(r_n^2 - r_s^2)\Gamma_t}{\Delta y}$

3.4. DISCRETIZACIÓN DEL TÉRMINO CONVECTIVO

Partiendo de la ecuación de transporte para ϕ (ecuación 3.16) y eliminando los términos transitorio y fuente, se obtiene la ecuación de transporte en estado estable incluyendo los efectos convectivos y difusivos (ecuación 3.17).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\bar{V}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (\text{Ec } 3.16)$$

$$\nabla \cdot (\rho\bar{V}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) \quad (\text{Ec } 3.17)$$

Por simplicidad, expresando la ecuación 3.17 en coordenadas cartesianas en una sola dimensión, x .

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \quad (\text{Ec } 3.18)$$

E integrando sobre el volumen de control mostrado en la Figura 3

$$\int_w^e \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) dx = \int_w^e \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) dx \quad (\text{Ec } 3.19)$$

$$(\rho u \phi A)_e - (\rho u \phi A)_w = \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \quad (\text{Ec } 3.20)$$

Ahora se hace necesario aproximar numéricamente las derivadas presentes en la ecuación 3.20:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (\text{Ec } 3.21)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \quad (\text{Ec } 3.22)$$

Y sustituyendo en la ecuación 3.20 con las ecuaciones 3.21 y 3.22

$$(\rho u \phi A)_e - (\rho u \phi A)_w = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) = 0 \quad (\text{Ec } 3.23)$$

La ecuación 3.23 puede escribirse en términos de F y D , que representan los flujos convectivos y difusivos a través de las fronteras del volumen de control respectivamente.

$$\begin{aligned} F_e &= (\rho u A)_e \\ F_w &= (\rho u A)_w \end{aligned} \quad (\text{Ec } 3.24)$$

$$\begin{aligned} D_e &= \frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x} \\ D_w &= \frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x} \end{aligned} \quad (\text{Ec } 3.25)$$

Resultando en la ecuación 3.26

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (\text{Ec } 3.26)$$

Nótese que la ecuación 3.26 es una función de ϕ_e y ϕ_E donde el primero es el valor de la propiedad en la frontera derecha del volumen de control, mientras que el segundo es el valor de la propiedad en la celda colindante con dicha frontera.

De forma similar para la frontera izquierda; ϕ_w y ϕ_W son los valores de ϕ en la frontera izquierda y en la celda colindante con dicha frontera. Como los valores de ϕ son conocidos únicamente en el centro de cada volumen de control, es necesario emplear un esquema de interpolación para calcular ϕ_w y ϕ_e .

3.5. ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN DEL TÉRMINO CONVECTIVO

Diferencias centradas para el término convectivo

Existen múltiples formas de calcular o “estimar” ϕ_w y ϕ_e , entre ellas; las diferencias centrales, el método “aguas arriba” más conocido como upwind, y la formulación híbrida. El primero de estos métodos consiste en aplicar un esquema de interpolación lineal basado en el esquema de “diferencia centrales” por el cual recibe su nombre. En las ecuaciones 3.27 y 3.28 se puede apreciar como un esquema de interpolación lineal es equivalente al promedio aritmético cuando el valor a calcular se encuentra en el punto medio entre los valores de ϕ empleados para la interpolación.

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (\text{Ec } 3.27)$$

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (\text{Ec } 3.28)$$

Incorporando las ecuaciones 3.27 y 3.28 en la ecuación 3.26, se obtiene la ecuación 3.29, mientras que la ecuación de continuidad se puede expresar como la ecuación 3.30.

$$\frac{F_e}{2}(\phi_E + \phi_P) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (\text{Ec } 3.29)$$

$$F_e - F_w = 0 \quad (\text{Ec } 3.30)$$

Reagrupando, manipulando algebraicamente y simplificando la ecuación 3.29 se puede llegar a las ecuaciones 3.31 y 3.32.

$$\left[\left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \right] \phi_P = \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W \quad (\text{Ec } 3.31)$$

$$\left[\left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) + \left(D_w - \frac{F_w}{2} \right) (F_e - F_w) \right] \phi_P = \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W \quad (\text{Ec } 3.32)$$

De forma similar al procedimiento utilizado para la discretización del término convectivo, es posible agrupar los términos que acompañan a ϕ en coeficientes denominados a_E , y a_W para las celdas a la derecha y a la izquierda de la celda en cuestión respectivamente. El coeficiente para la celda central se denomina a_P .

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \quad (\text{Ec } 3.33)$$

$$a_W = D_w + \frac{F_w}{2} \quad (\text{Ec } 3.34)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (\text{Ec } 3.35)$$

Hasta este momento, se ha asumido que se conoce el campo de velocidades y la densidad del fluido, y en función de estos valores se han calculado los flujos (F) a través de las fronteras del volumen de control, que a su vez se utilizaron en la definición de a_E , a_W y a_P . Sin embargo, ϕ puede asumir múltiples significados, entre ellos alguna de los componentes de la velocidad (u, v), lo que conduciría a una ecuación no lineal, ya que los coeficientes de la ecuación resultan ser funciones de la variable dependiente.

El uso de las diferencias centradas para el cálculo del término convectivo, a pesar de ser bastante atractivo por su sencillez, es altamente inestable y puede conducir a resultados sin sentido físico. Una explicación detallada sobre los problemas de estabilidad de esta formulación para números de Peclet superiores a 2, puede encontrarse en [23]. Por otro lado, un aspecto positivo de esta técnica de

discretización es que es un orden de magnitud más “precisa” que los esquemas Upwind o Hybrid que se explicarán a continuación. En otras palabras, según la expansión en series de Taylor, el orden de magnitud del error en la ecuación discretizada respecto a la ecuación original es el cuadrado del espaciamiento nodal ΔX^2 , comparado con un error de magnitud ΔX para la formulación Upwind. Más detalles sobre la discretización en volúmenes finitos pueden encontrarse en la literatura [17], [23].

Formulación Upwind para el término convectivo

El método Upwind para la discretización del término convectivo es la forma más estable y sencilla de discretizar el término convectivo, y se basa en una interpolación de primer orden para la propiedad ϕ en las fronteras del volumen de control. Básicamente asume el valor de ϕ en la frontera igual al valor de ϕ en el nodo más cercano aguas arriba. Esta formulación funciona muy bien para problemas donde los efectos convectivos se imponen sobre los efectos difusivos, es decir, para números de Peclet altos. Sin embargo falla cuando los efectos difusivos son importantes, al inducir excesiva difusividad numérica [17]. Según la expansión en series de Taylor, la magnitud del error asociado al método Upwind es de orden ΔX .

Retomando la ecuación discretizada en función de ϕ_e y ϕ_w (Ec. 3.36), pero esta vez definiendo ϕ_e y ϕ_w como se muestra en las ecuaciones 3.37 y 3.38

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (\text{Ec } 3.36)$$

$$\phi_w = \begin{cases} \phi_W, & u > 0 \\ \phi_P, & u < 0 \end{cases} \quad (\text{Ec } 3.37)$$

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_E, & u < 0 \\ \phi_P, & u > 0 \end{cases} \quad (\text{Ec } 3.38)$$

Utilizando las ecuaciones 3.37 y 3.38 se pueden establecer nuevas definiciones para los coeficientes a_W y a_E , como se muestra a continuación.

$$a_W = \begin{cases} D_w + F_w, & F_w, F_e > 0 \\ D_w, & F_w, F_e < 0 \end{cases} \quad (\text{Ec } 3.39)$$

$$a_E = \begin{cases} D_e - F_e, & F_w, F_e < 0 \\ D_e, & F_w, F_e > 0 \end{cases} \quad (\text{Ec } 3.40)$$

$$a_p = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (\text{Ec } 3.41)$$

Formulación híbrida para el término convectivo

La formulación híbrida, como su nombre lo indica, es una mezcla entre la formulación basada en diferencias centrales y la formulación Upwind, tratando de aprovechar las cualidades de cada una. Para números de Peclet bajos donde los efectos difusivos son importante se utiliza la formulación basada en diferencias centrales, aprovechando que esta no presenta problemas de estabilidad en esta región, mientras que para los números de Peclet altos se utiliza la formulación Upwind. De esta forma se aprovechan las ventajas de cada algoritmo y se evitan los problemas de inestabilidad o excesiva “falsa difusividad”. La formulación híbrida, por las características mencionadas anteriormente, será la empleada en el desarrollo de este trabajo. A continuación se presentan las definiciones para cada uno de los coeficientes para problemas en 1D, 2D y 3D.

Tabla 6. Definición de los coeficientes para flujos convectivos y difusivos

Frontera	w	e	s	n	b	t
F	$(\rho u)_w A_w$	$(\rho u)_e A_e$	$(\rho u)_s A_s$	$(\rho u)_n A_n$	$(\rho u)_b A_b$	$(\rho u)_t A_t$
D	$\frac{\Gamma_w}{\Delta X} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\Delta X} A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\Delta Y} A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\Delta Y} A_n$	$\frac{\Gamma_b}{\Delta Z} A_b$	$\frac{\Gamma_t}{\Delta Z} A_t$

Tabla 7. Coeficientes de discretización para la formulación híbrida de un problema difusivo-convectivo

	Flujo unidimensional	Flujo bidimensional	Flujo tridimensional
a_w	$\max\left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right), 0\right]$	$\max\left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right), 0\right]$	$\max\left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right), 0\right]$
a_e	$\max\left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right), 0\right]$	$\max\left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right), 0\right]$	$\max\left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right), 0\right]$
a_s		$\max\left[F_s, \left(D_s + \frac{F_s}{2}\right), 0\right]$	$\max\left[F_s, \left(D_s + \frac{F_s}{2}\right), 0\right]$
a_n		$\max\left[-F_n, \left(D_n - \frac{F_n}{2}\right), 0\right]$	$\max\left[-F_n, \left(D_n - \frac{F_n}{2}\right), 0\right]$
a_b			$\max\left[F_b, \left(D_b + \frac{F_b}{2}\right), 0\right]$
a_t			$\max\left[-F_t, \left(D_t - \frac{F_t}{2}\right), 0\right]$
ΔF	$F_e - F_w$	$F_e - F_w + F_n - F_s$	$F_e - F_w + F_n - F_s + F_t - F_b$

Donde F y D se definen en la Tabla 6, y la ecuación general

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_B \phi_B + a_T \phi_T \quad (\text{Ec } 3.42)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_B + a_T \quad (\text{Ec } 3.43)$$

Cualquiera sea el método de discretización escogido (volúmenes, diferencias o elementos finitos), o el método de acoplamiento de la presión (SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC, PISO), el término convectivo presenta una dificultad especial en la ecuación a discretizar ya que es el que introduce la no-linealidad así como los problemas de acoplamiento entre las formas discretas de las ecuaciones de

conservación de momentum y la ecuación de conservación de masa en términos de la presión (más conocida como la ecuación de Poisson).

3.6. ACOPLAMIENTO DE PRESIONES

El campo escalar de presiones en un flujo es el responsable de imponer el principio de conservación de masa en las ecuaciones de los momentos, llevando el campo vectorial de velocidad a un espacio de divergencia cero, pero dicho campo de presiones no puede despejarse a partir de la formulación estándar de las ecuaciones de flujo y se debe incorporar un algoritmo tipo SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC o PISO para tal propósito [17].

Las ecuaciones de flujo tal como se trabajan en este proyecto son un sistema de 3 ecuaciones (momentum X, momentum Y y conservación de masa) con tres incógnitas (U, V y P). A simple vista, un sistema determinado ya que se tiene igual cantidad de ecuación e incógnitas. Sin embargo, la ecuación de conservación de masa está escrita en términos de las velocidades, mientras que la presión no está explícitamente representada en ella, y por ende, no puede emplearse para despejar el campo de presiones.

La presión en la mecánica de fluidos tiene dos componentes; la presión hidrodinámica y la presión termodinámica. La presión termodinámica es utilizada para calcular las propiedades de los fluidos y en la ecuación de conservación de masa para flujos compresibles. Por otra parte, la presión hidrodinámica es la que aparece representada en términos de su gradiente en las ecuaciones de conservación de momento. La presión hidrodinámica tiene también una connotación matemática, ya que puede demostrarse que todo campo vectorial (\vec{V}) puede llevarse a un espacio de divergencia cero (\vec{V}^{∇^0}) mediante la aplicación de un gradiente escalar (∇P), de forma que la presión hidrodinámica será la responsable de imponer el principio de conservación de masa en las ecuaciones de los momentos, como se muestra en la ecuación 3.44.

$$\bar{V} - \nabla P = \bar{V}^{\nabla 0} \quad (\text{Ec } 3.44)$$

El principio de todos los algoritmos mencionados puede explicarse partiendo de la forma vectorial de la ecuación de conservación del momentum (Ec. 3.45) y discretizando solo el término transitorio para expresar el producto $(\rho\bar{V})$ en el tiempo $t + \Delta t$ en función de la velocidad y la presión en el tiempo t , (Ec. 3.46). Despejando el término $(\rho\bar{V})^{t+\Delta t}$ y considerando la ecuación de continuidad que estipula $\nabla \cdot (\rho\bar{V})^{t+\Delta t} = 0$, se pueden asociar los términos de la ecuación 3.46 con la ecuación 3.44.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{V}) + \bar{V} \cdot \nabla(\rho\bar{V}) = -\nabla P + \nabla(\mu\nabla \cdot \bar{V}) + \bar{S}_v \quad (\text{Ec } 3.45)$$

$$\frac{(\rho\bar{V})^{t+\Delta t} - (\rho\bar{V})^t}{\Delta t} = -\bar{V} \cdot \nabla(\rho\bar{V}) + \nabla(\mu\nabla \cdot \bar{V}) + \bar{S}_v - \nabla P \quad (\text{Ec } 3.46)$$

$$\underbrace{(\rho\bar{V})^{t+\Delta t}}_{V^{\nabla 0}} = \underbrace{(\rho\bar{V})^t + \Delta t[-\bar{V} \cdot \nabla(\rho\bar{V}) + \nabla(\mu\nabla \cdot \bar{V}) + \bar{S}_v - \nabla P]^t}_V \quad (\text{Ec } 3.47)$$

En la literatura pueden encontrarse varios métodos de acoplamientos, sin embargo el más conocido de estos es SIMPLE, un acrónimo para *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*. Este algoritmo fue desarrollado por Spalding y Patankar en 1972 y grosso modo consiste en expresar el principio de conservación de masa en términos de la presión hidrodinámica. Para tal fin, el algoritmo plantea avanzar las velocidades utilizando las ecuaciones de los momentos, para luego imponer la conservación de masa mediante la aplicación de

un campo de presiones [17]. Este algoritmo es el más sencillo y robusto de todos los conocidos y por tal razón será implementado en este proyecto.

También existen otros métodos como SIMPLER, un acrónimo en inglés para *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations – Revised*. Este algoritmo fue desarrollado por Patankar en 1980 con base en el algoritmo SIMPLE desarrollado por el mismo en 1972. Comparado con su predecesor, SIMPLER implica más operaciones por cada iteración pero requiere un menor número de iteraciones para converger a una solución, por lo que resulta ser más eficiente en términos computacionales. Otros algoritmos como SIMPLEC (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations - Consistent*) y PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operations*), son también modificaciones del algoritmo original SIMPLE. Estos últimos resultan útiles en casos específicos, sin embargo, no se puede afirmar categóricamente que se desempeñan mejor que SIMPLER.

3.7. RESUMEN DEL ALGORITMO SIMPLE

En la Tabla 7 se definieron los coeficientes de discretización para un problema difusivo-convectivo, empleando un esquema de diferencias centradas para el término difusivo y un esquema híbrido para el término convectivo. La forma discreta de la ecuación también se definió en la ecuación 3.42. A continuación se describirá brevemente el algoritmo SIMPLE para la solución transitoria de un campo de flujo incompresible en coordenadas cartesianas.

Como se mencionó anteriormente, en este caso se trata de una solución transitoria y por lo tanto el primer paso es definir condiciones iniciales adecuadas para todas las variables; presión y velocidad. El campo vectorial de velocidad, al inicio y en todo momento debe ser conservativo.

Partiendo de las condiciones iniciales, es necesario avanzar las velocidades en el tiempo, de (t) a $(t + 1)$. Para este propósito se utilizan las ecuaciones de los

momentos en x y y , las cuales se muestran en las ecuaciones 3.48 y 3.49 respectivamente.

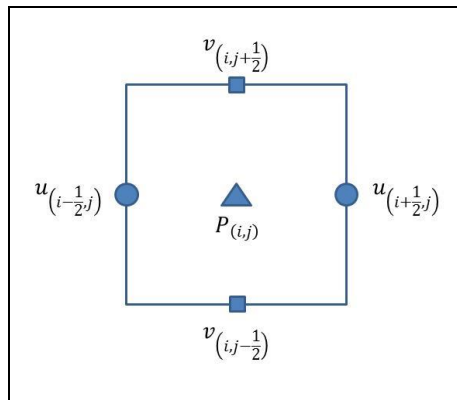
$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (\text{Ec } 3.48)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (\text{Ec } 3.49)$$

Para avanzar los dos componentes de la velocidad se debe utilizar la forma discreta de las ecuaciones de los momentos, la cual se definió previamente en la ecuación 3.42. Para este paso es posible utilizar tanto un esquema explícito como un esquema implícito.

En este trabajo se utilizó una malla ortogonal escalonada, también conocida como “staggered” o desplazada. La selección de dicha malla se da para evitar problemas de acoplamiento entre las formas discretas de las ecuaciones de momentos y la ecuación de conservación de masa en términos de las presiones, propias del esquema SIMPLE cuando se utilizan mallas no escalonadas también conocidas como mallas “collocated”. Una desventaja de las mallas desplazadas respecto a las mallas colocadas es que las variables (u, v, p) ya no se almacenan en los mismos nodos y se hace necesario definir 3 mallas diferentes, una para cada cantidad escalar, como se muestra en la Figura 7 y la Figura 8.

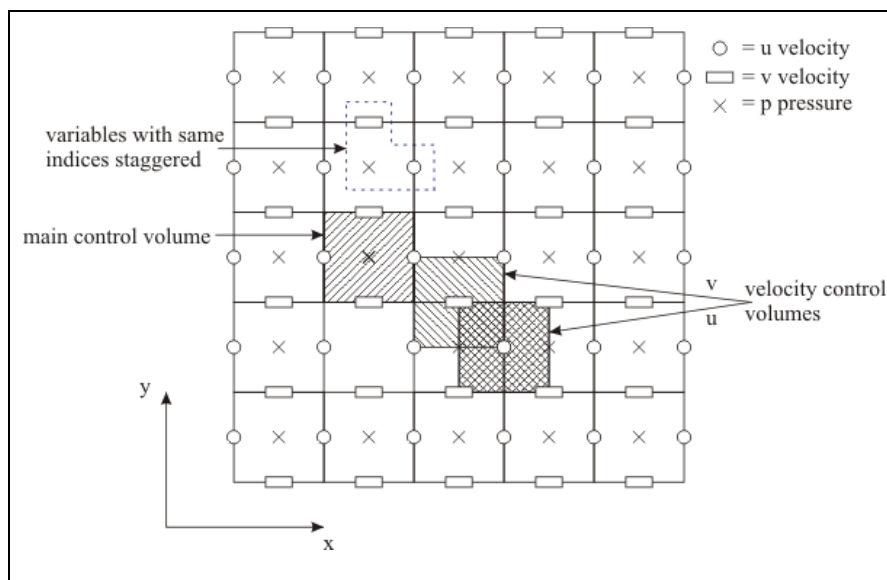
Figura 7. Esquema de una celda en una malla ortogonal escalonada



Una vez se han discretizado las ecuaciones de los momentos, estas deben resolverse para determinar un campo de velocidades aproximado en $(t + 1)$. En caso de que se haya escogido un esquema implícito, será necesario implementar un algoritmo para llenar una matriz *sparse* e invertirla. Si por el contrario se escogió un esquema explícito, el campo de velocidad aproximado en el siguiente time-step (\bar{V}') puede entonces despejarse fácilmente de la ecuación discretizada.

Una vez se conoce el campo de velocidades en $(t + 1)$, se hace necesario determinar el campo de presiones que llevaría dicho campo de velocidad a un espacio de divergencia cero. Para tal propósito se debe resolver una ecuación adicional (ecuación 3.50), cuyos coeficientes se muestran en la Tabla 8.

Figura 8. Esquema de una malla ortogonal escalonada



Fuente: http://nptel.ac.in/courses/112104030/lecture27/27_3.htm

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + a_B p'_B + a_T p'_T + b \quad (\text{Ec } 3.50)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_B + a_T \quad (\text{Ec } 3.51)$$

$$b = (\rho u' A)_e + (\rho u' A)_w + (\rho v' A)_n + (\rho v' A)_s \quad (\text{Ec } 3.52)$$

Cabe recalcar que los coeficientes mostrados en la Tabla 8 están definidos en las fronteras (e, w, n, s) del volumen de control para la presión, mientras que los coeficientes mostrados en la Tabla 7 corresponden a los volúmenes de control para cada uno de las componentes de la velocidad. Las letras mayúsculas empleadas en la definición de los coeficientes d hacen referencia a las celdas adyacentes empleadas para la discretización de las ecuaciones de los momentos. Una descripción más detallada del algoritmo y su implementación se puede encontrar en la literatura [23].

Tabla 8. Coeficientes de discretización para la ecuación de la presión

Frontera	w	e	s	n
F	$(\rho dA)_w$	$(\rho dA)_e$	$(\rho dA)_s$	$(\rho dA)_n$
d	$\left(\frac{A}{a_{u,p}}\right)_w$	$\left(\frac{A}{a_{u,p}}\right)_e$	$\left(\frac{A}{a_{v,p}}\right)_s$	$\left(\frac{A}{a_{v,p}}\right)_n$

Una vez resuelta la ecuación implícita para la pseudo-presión p' , esta debe usarse para actualizar el campo de presiones p y para corregir el campo de velocidad \bar{V} , como se muestra en las ecuaciones 3.53, 3.54 y 3.55.

$$p^{t+1} = p + p' \quad (\text{Ec } 3.53)$$

$$u^{t+1} = u' - d \frac{\partial p'}{\partial x} \quad (\text{Ec } 3.54)$$

$$v^{t+1} = v' - d \frac{\partial p'}{\partial y} \quad (\text{Ec } 3.55)$$

Es importante imponer las condiciones de frontera en este nuevo campo de velocidad, sin embargo, este proceso puede resultar tedioso ya que varía para cada cantidad escalar y cada tipo de condición de frontera que se desee aplicar. Un resumen de las condiciones de frontera para la presión y la velocidad se presenta en la Tabla 9.

Tabla 9. Forma discreta de las condiciones de frontera para la velocidad y la presión

	<i>Velocidad en x (u)</i>		<i>Velocidad en y (v)</i>		<i>Presión (p)</i>	
Borde / Tipo	Tipo I	Tipo II	Tipo I	Tipo II	Tipo I	Tipo II
	$u_{wall} =$	$\left. \frac{\partial u_{wall}}{\partial \eta} \right _{\eta_{\pm}} =$	$v_{wall} =$	$\left. \frac{\partial v_{wall}}{\partial \eta} \right _{\eta_{\pm}}$	$p_{wall} =$	$\left. \frac{\partial p_{wall}}{\partial \eta} \right _{\eta_{\pm}}$
Oeste	$u(:,1)$	$\frac{u(:,2) - u(:,1)}{\Delta x}$	$\frac{v(:,1) + v(:,2)}{2}$	$\frac{v(:,2) - v(:,1)}{\Delta x}$	$\frac{p(:,2) + p(:,1)}{2}$	$\frac{p(:,2) - p(:,1)}{\Delta x}$
Este	$u(:,end)$	$\frac{u(:,end-1) - u(:,end)}{\Delta x}$	$\frac{v(:,end) + v(:,end-1)}{2}$	$\frac{v(:,end) - v(:,end-1)}{\Delta x}$	$\frac{p(:,end) + p(:,end-1)}{2}$	$\frac{p(:,end) - p(:,end-1)}{\Delta x}$
Superior	$\frac{u_{(end,:)} + u_{(end-1,:)}}{2}$	$\frac{u_{(end,:)} - u_{(end-1,:)}}{\Delta y}$	$v(:,end)$	$\frac{v_{(end,:)} - v_{(end-1,:)}}{\Delta y}$	$\frac{p_{(end,:)} + p_{(end-1,:)}}{2}$	$\frac{p_{(end,:)} - p_{(end-1,:)}}{\Delta y}$
Inferior	$\frac{u_{(1,:)} + u_{(2,:)}}{2}$	$\frac{u_{(2,:)} - u_{(1,:)}}{\Delta y}$	$v(:,1)$	$\frac{v_{(2,:)} - v_{(1,:)}}{\Delta y}$	$\frac{p_{(1,:)} + p_{(2,:)}}{2}$	$\frac{p_{(2,:)} - p_{(1,:)}}{\Delta y}$

4. VALIDACIÓN DEL CÓDIGO

Si bien las técnicas de solución numéricas son aplicables a un mayor número de problemas que las técnicas analíticas, estas no necesariamente proporcionan resultados correctos en todos los casos. Diferentes técnicas de simulación resultan más apropiadas que otras para un problema específico y por tal razón la aplicabilidad de un método numérico para solucionar un determinado problema debe validarse mediante la comparación de los resultados obtenidos; ya sea con datos experimentales, otras técnicas de simulación o soluciones analíticas si es que estas están disponibles.

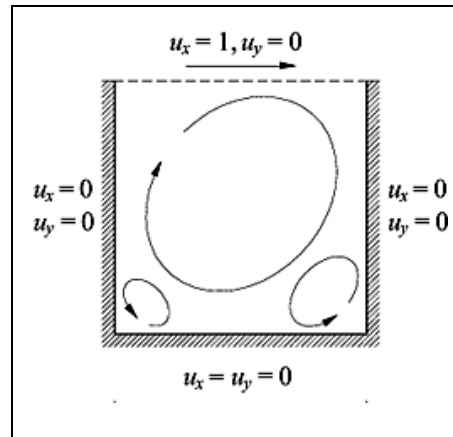
En ese orden de ideas, en este capítulo se presenta en primer lugar la validación de problema “Lid-Driven Cavity”, comparando los resultados obtenidos de la simulación con otros resultados disponibles en la literatura. Posteriormente se presenta la solución analítica simplificada para la capa límite hidrodinámica y la capa límite térmica para un flujo laminar sobre una placa plana, dichos resultados son comparados con la solución numérica para el mismo problema sin ningún tipo de simplificación.

4.1. PROBLEMA LID-DRIVEN CAVITY

El “Lid-Driven Cavity” es un problema bien conocido en la mecánica de fluidos computacional en el que se establece una geometría y unas condiciones de frontera estándares con el fin de poder comparar la eficiencia y exactitud de diferentes algoritmos de solución, así como validar nuevos esquemas de solución de las ecuaciones de conservación. El problema consiste originalmente de una cavidad cúbica de dimensiones $1 \times 1 \times 1$ [m], a pesar de que normalmente se resuelve de forma bidimensional utilizando una cavidad cuadrada de 1×1 [m] (asumiendo que la tercera dimensión es lo suficientemente extensa para reducir el

problema a 2D), donde todas las paredes son estacionarias exceptuando la pared superior, la cual se mueve horizontalmente con una velocidad de 1 [m/s]. Un esquema del dominio y las condiciones de frontera se muestra en la Figura 9.

Figura 9. Esquema del problema “Lid-Driven Cavity”.



Fuente: Internet

Usualmente el problema se resuelve de forma adimensional para varios números de Reynolds; donde la longitud característica es la dimensión de la pared y los valores de densidad y viscosidad dinámica y/o el valor de la viscosidad cinemática se establecen a priori para producir un número de Reynolds específico. Las ecuaciones que gobiernan el campo de flujo y de presión, la técnica de mallado, el procedimiento para la discretización y el algoritmo de solución para este problema son los mismos descritos en los capítulos 2 y 3.

Para la solución de este problema se empleó una malla de 130x130 volúmenes de control en la malla colocada. A la densidad se le asignó un valor de 1 [Kg/m³] y la viscosidad escogida fue 0.001 ya sea [kg/m-s] o [m²/s], resultando en un número de Reynolds igual a 1000 basado en una longitud característica de 1 [m]. Para la obtención de los resultados aquí presentados se empleó el esquema de estado estable con todos los parámetros de relajación iguales a 0.9. El criterio de convergencia utilizado para detener la simulación es cuando el máximo de los

errores en la solución de las ecuaciones de los momentos sea inferior a $1e-14$. La conservación de masa es verificada en cada iteración y el orden de magnitud de la misma debe ser siempre inferior a $1e-14$, si los parámetros de relajación o el step-time son los apropiados, usualmente está se encuentra en el orden $1e-18$.

Erturk et al. [7] presentan la solución del problema conocido como “Lid-Driven Cavity” para varios números de Reynolds utilizando la formulación “Streamfunction-Vorticity” y una discretización en diferencias finitas. En comparación con el trabajo desarrollado por Erturk et al., la formulación desarrollada en este proyecto se basa en el método de los volúmenes finitos y las ecuaciones de transporte se mantienen en términos de las variables primitivas, lo que resulta favorable al propósito de validar el código aquí desarrollado, permitiendo comparar los resultados para el mismo problema empleando técnicas de solución completamente diferentes.

En la Figura 10 se grafican las curvas de nivel para las líneas de corriente de la solución en estado estacionario para $Re = 1000$ obtenida por Erturk et al. [7], la misma gráfica pero obtenida con el código aquí desarrollado se muestra en la Figura 14. También se presentan las gráficas del campo de velocidades (Figura 11 y Figura 12) y del campo de presiones (Figura 13), todas obtenidas con los resultados de la simulación.

Dado que es difícil comparar entre gráficas de curvas de nivel para contrastar las 2 soluciones, en la Figura 15 se graficaron los resultados de la simulación junto con los datos provistos por Erturk et al., tanto para la componente horizontal de la velocidad (u) a lo largo de la línea vertical que pasa por el centro del dominio, como para la componente vertical de la velocidad (v) a lo largo de la línea horizontal que pasa por el centro del dominio. Los valores de los puntos graficados como * se muestran en la Tabla 10.

Analizando la Figura 15, se puede concluir que el algoritmo desarrollado replica adecuadamente los resultados disponibles en la literatura. Las pequeñas diferencias entre los 2 resultados son debidas a la densidad de la malla empleada;

en este ejemplo se utilizaron 130x130 volúmenes de control mientras que Erturk et al. utilizaron una malla mucho más densa con 601x601 nodos.

Tabla 10. Perfiles de velocidad para las líneas medias del dominio para el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, con $Re = 1000$. Reportados por Erturk et al.

Y / Re		1000		X / Re		1000	
1	1	0.2	-0.3756	1	0	0.15	0.3756
0.99	0.8486	0.18	-0.3869	0.985	-0.0973	0.135	0.3705
0.98	0.7065	0.16	-0.3854	0.97	-0.2173	0.12	0.3605
0.97	0.5917	0.14	-0.369	0.955	-0.34	0.105	0.346
0.96	0.5102	0.12	-0.3381	0.94	-0.4417	0.09	0.3273
0.95	0.4582	0.1	-0.296	0.925	-0.5052	0.075	0.3041
0.94	0.4276	0.08	-0.2472	0.91	-0.5263	0.06	0.2746
0.93	0.4101	0.06	-0.1951	0.895	-0.5132	0.045	0.2349
0.92	0.3993	0.04	-0.1392	0.88	-0.4803	0.03	0.1792
0.91	0.3913	0.02	-0.0757	0.865	-0.4407	0.015	0.1019
0.9	0.3838	0	0	0.85	-0.4028	0	0
0.5	-0.062			0.5	0.0258		

Figura 10. Solución del problema “Lid-Driven Cavity” para $Re = 1000$, provista por Erturk et al.

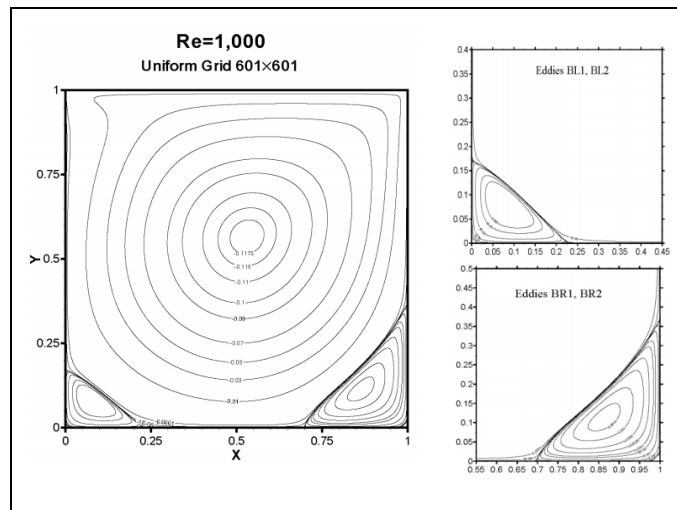


Figura 11. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para la componente horizontal de la velocidad en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$.

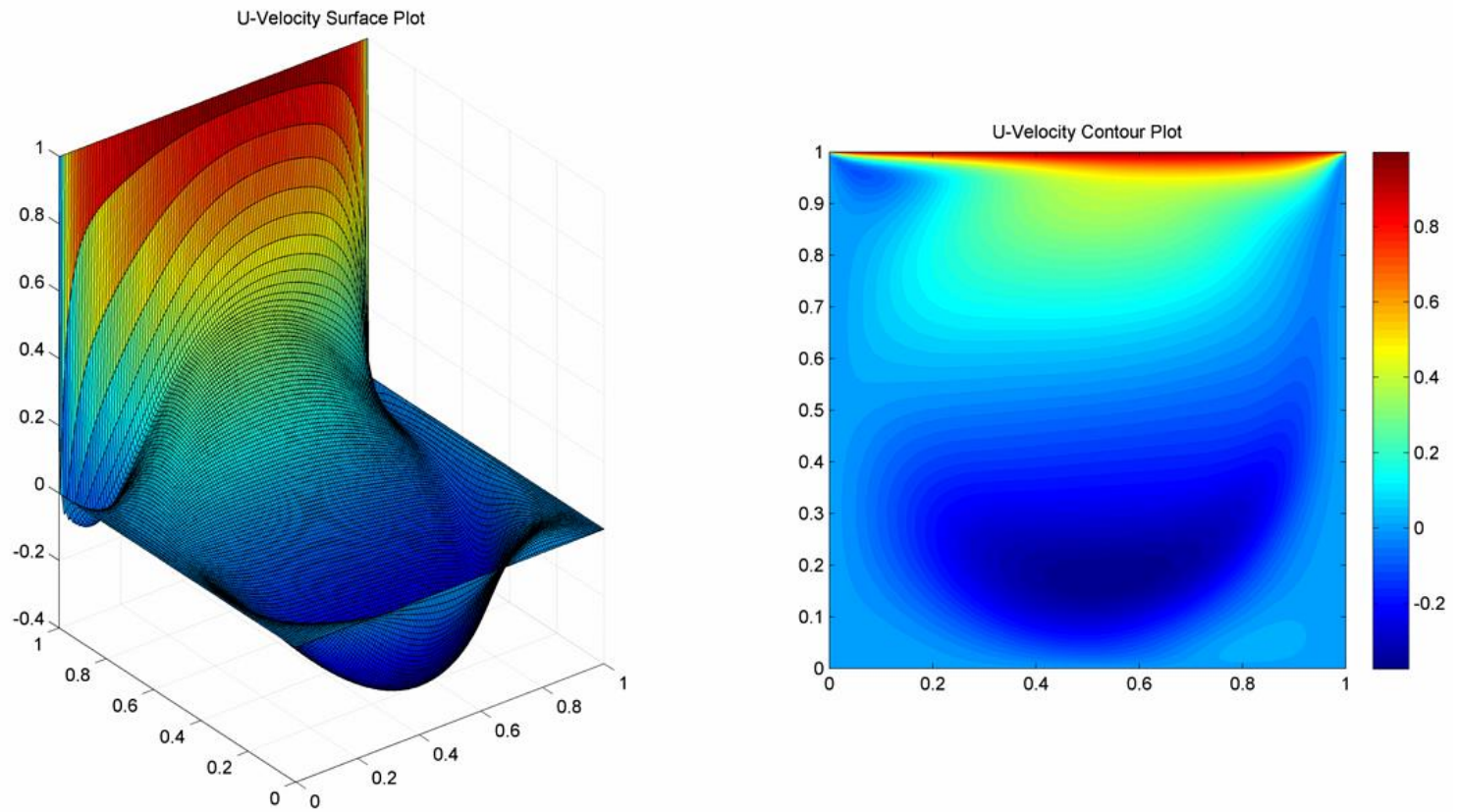


Figura 12. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para la componente vertical de la velocidad en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$.

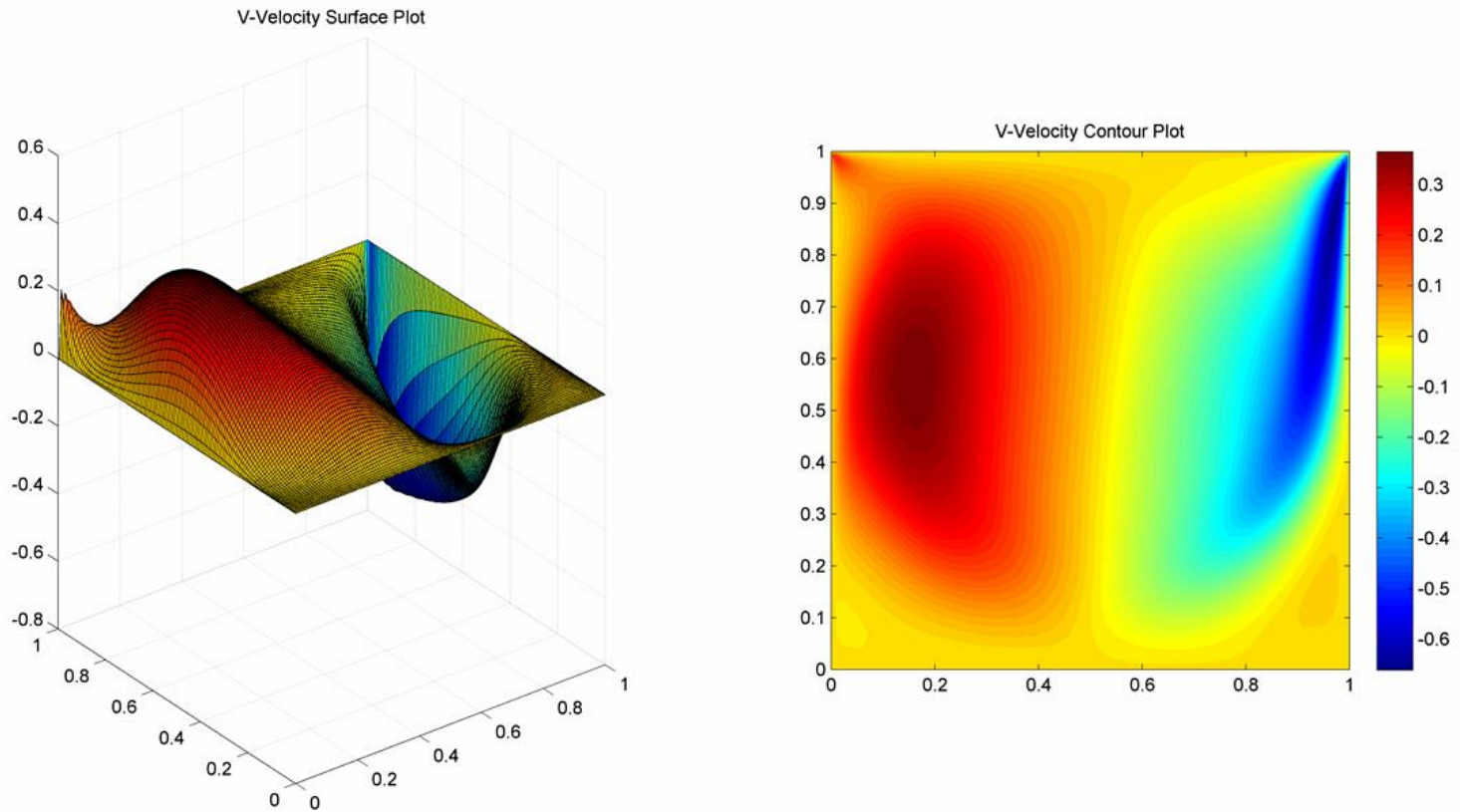


Figura 13. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para la presión hidrodinámica en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$.

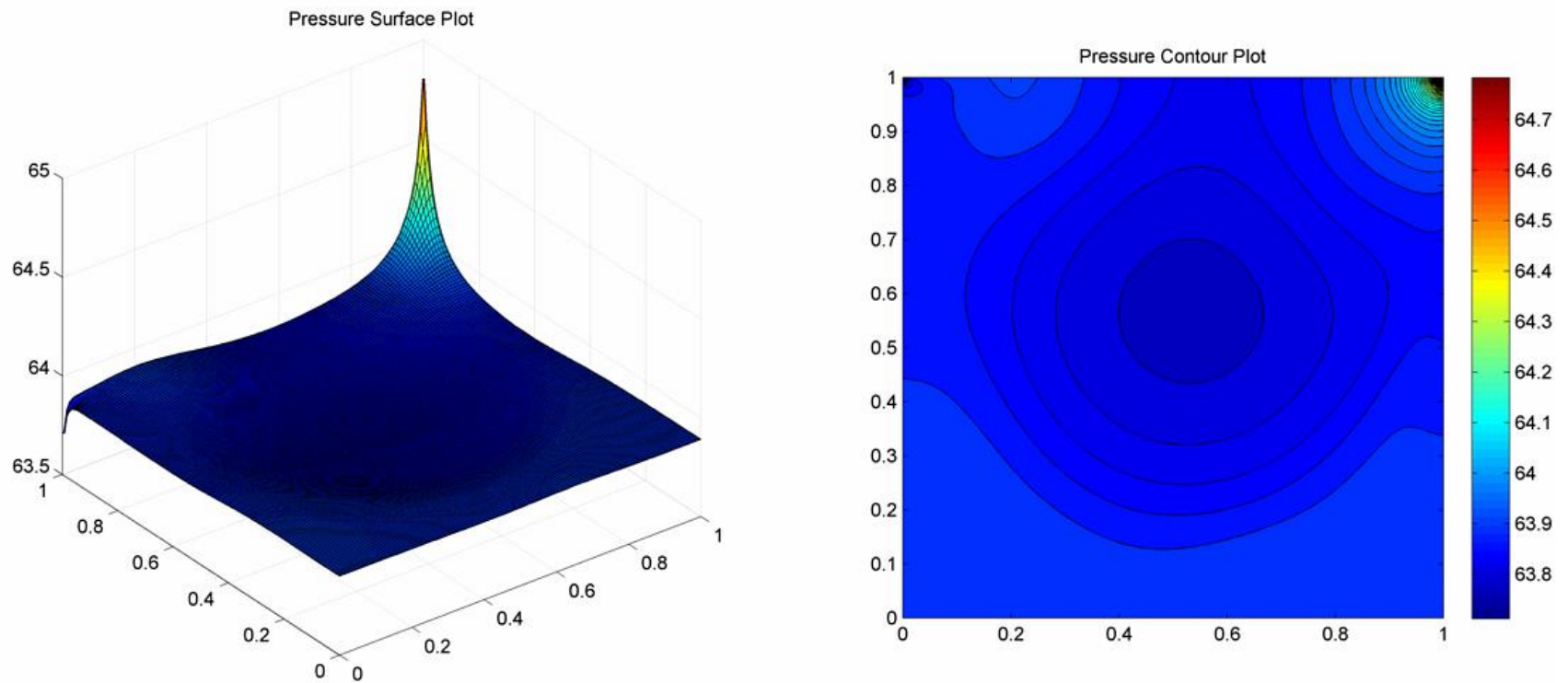


Figura 14. Superficie de nivel (izquierda) y curvas de nivel (derecha) para las líneas de corriente en el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, para $Re = 1000$.

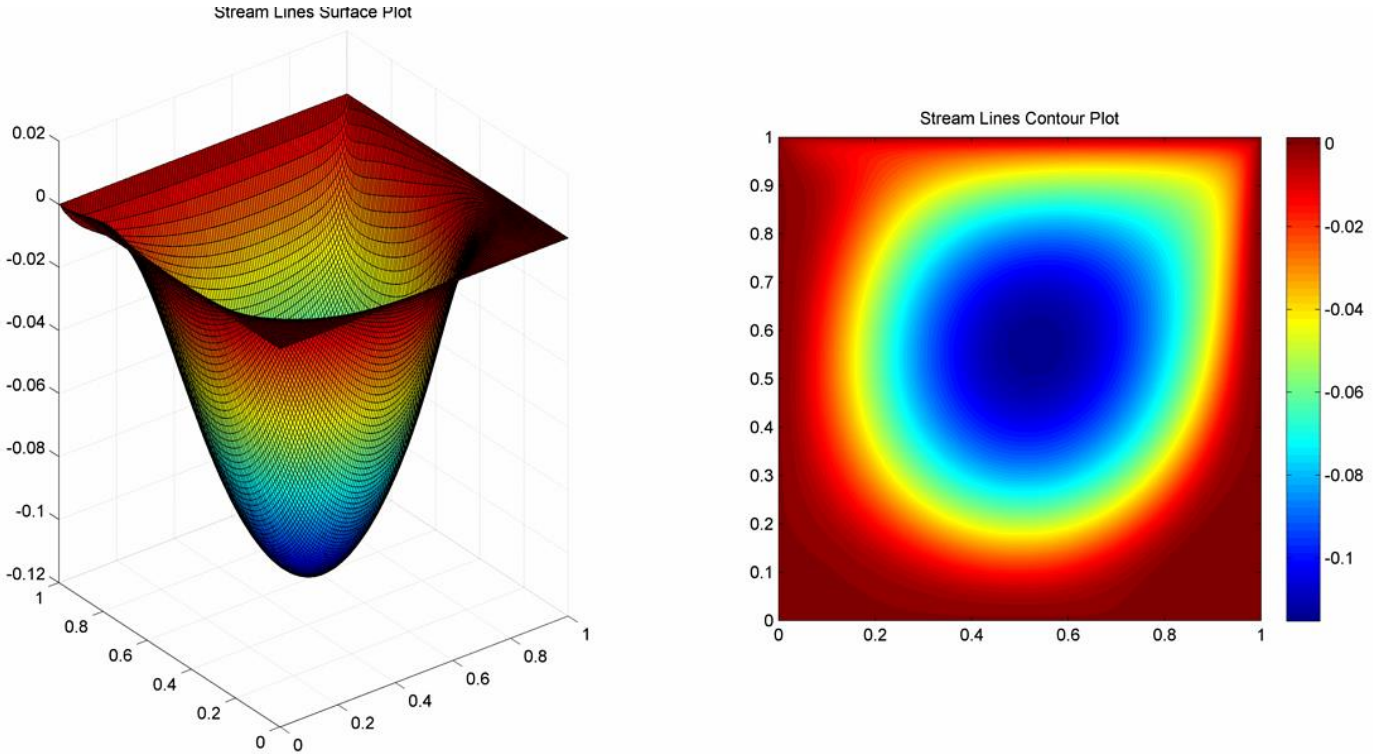
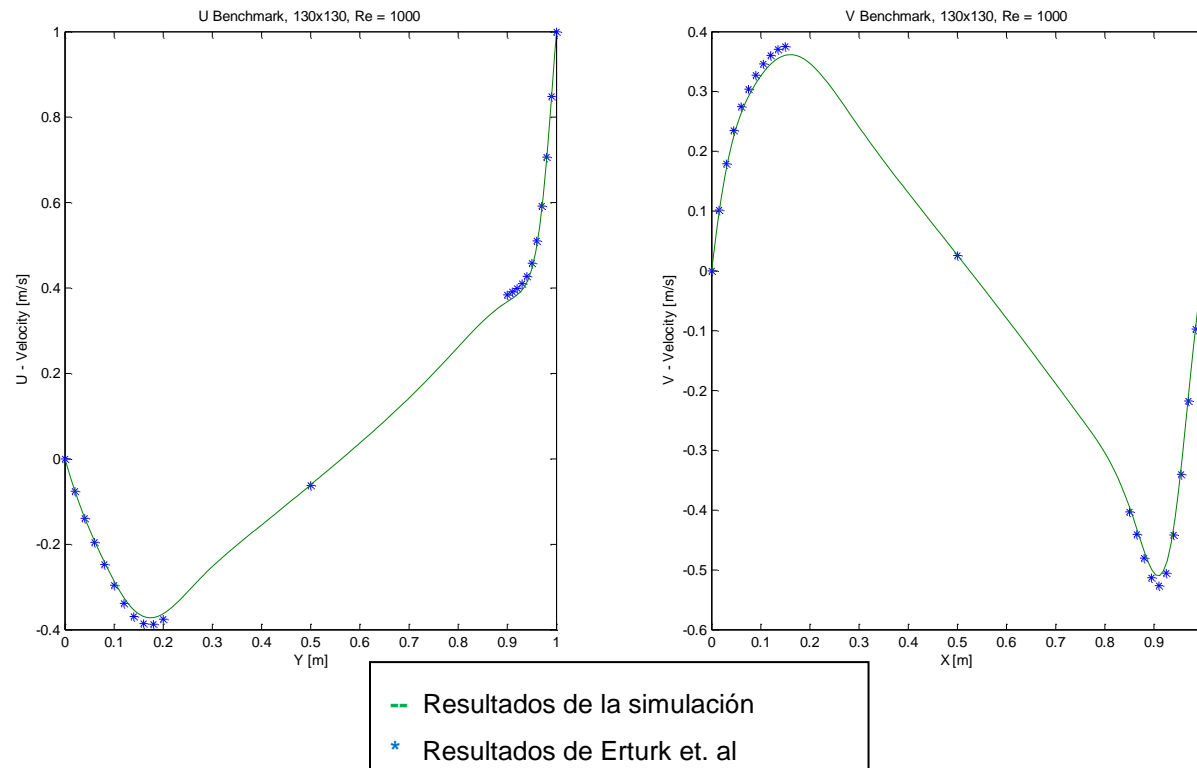


Figura 15. Para el problema conocido como “Lid-Driven Cavity”, con $Re = 1000$: Comparación de la componente horizontal de la velocidad a lo largo de la línea media vertical del dominio (izquierda). Comparación de la componente vertical de la velocidad a lo largo de la línea media horizontal del dominio (derecha).

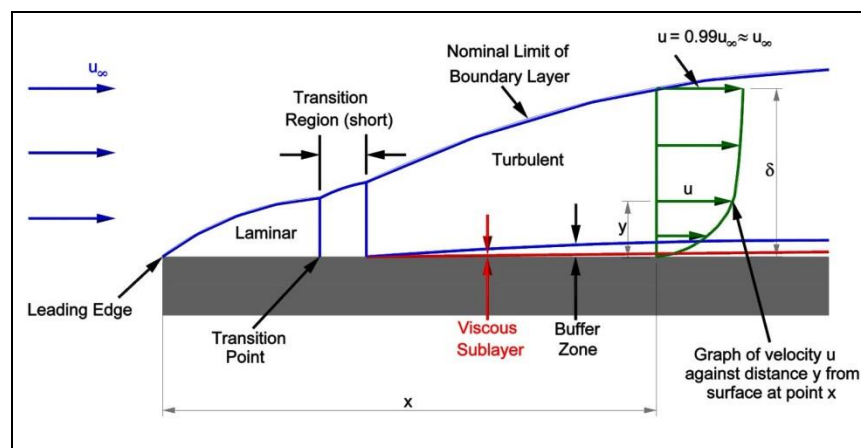


4.2. FLUJO 2D EN CANALES Y TUBERÍAS

Es bien sabido que la mayoría de los problemas en la mecánica de fluidos no pueden ser resueltos de forma analítica, sin embargo, bajo algunas hipótesis razonablemente válidas y ciertas simplificaciones de las ecuaciones que gobiernan el problema, pueden desarrollarse modelos simplificados cuya solución no requiere acudir a técnicas numéricas. Tal es el caso de las soluciones existentes para el espesor de las capas límite térmica e hidrodinámica para un flujo laminar sobre una placa plana, dicha solución simplificada resulta ser especialmente útil para validar esquemas numéricos como se presentará en esta sección.

En mecánica de fluidos, la capa límite o capa fronteriza de un fluido es la zona donde el movimiento de éste es perturbado por la presencia de un sólido con el que está en contacto. La capa límite se entiende como aquella en la que la velocidad del fluido en movimiento respecto al sólido estacionario varía desde cero hasta el 99% de la velocidad de la corriente no perturbada (freestream velocity). La capa límite puede ser laminar o turbulenta; aunque también pueden coexistir en ella zonas de flujo laminar y de flujo turbulento denominadas zonas de transición.

Figura 16. Esquema de la capa límite hidrodinámica sobre una placa plana.



Fuente: <http://www.tutorhelpdesk.com/homeworkhelp/Fluid-Mechanics-/Laminar-Boundary-Layer-Assignment-Help.html>

Para la solución de las ecuaciones de capa límite existen principalmente 2 métodos; estos son el método integral y el método exacto. El método integral realiza un balance de masa y energía para un volumen de control finito con el fin de derivar una ecuación integro-diferencial, la cual posteriormente soluciona de forma analítica asumiendo que la función para el espesor de la capa límite es un polinomio orden 2, 3 o hasta 4. El método integral es un método completamente analítico y fue el primero en proporcionar una solución aproximada para el espesor de la capa límite sobre una placa plana. A diferencia del método integral, el método exacto carece de solución analítica y por ende requiere de la implementación de técnicas numéricas. En este proyecto se escogió el método exacto por la naturaleza numérica de su solución, la cual se describe brevemente a continuación.

El método “exacto” utiliza una variable de similitud (η) para transformar la ecuación de conservación de masa (ecuación 4.3) y la ecuación de conservación de momentum en la dirección horizontal (ecuación 4.4); ambas inicialmente en términos de las variables primitivas (u, v) son expresadas en función de las líneas de corriente ψ (ecuación 4.5 y 4.6), utilizando las transformaciones para u y v en las ecuaciones 4.1 y 4.2.

$$v = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (\text{Ec } 4.1)$$

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (\text{Ec } 4.2)$$

$$\nabla \bar{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (\text{Ec } 4.3)$$

$$\bar{V} \cdot \nabla(\rho \bar{V}) = \nu \nabla^2 \bar{V} \quad (\text{Ec } 4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial v}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \nabla^2 \psi = 0 \quad (\text{Ec } 4.5)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \nu \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3} \quad (\text{Ec } 4.6)$$

La variable de similitud η trata de expresar y como función de x para reducir el número de variables independientes del sistema de ecuaciones, mientras que la función de similitud f trata de reducir el número de ecuaciones de 2 a 1. La relación parabólica entre x y ψ puede apreciarse claramente en la Figura 20.

$$y \sim \sqrt{x} \Rightarrow \eta = C_2 \frac{y}{\sqrt{x}} \quad (\text{Ec } 4.7)$$

$$\psi \sim \sqrt{x} \Rightarrow f = C_1 \frac{\psi}{\sqrt{x}} = f(\eta) \quad (\text{Ec } 4.8)$$

El objetivo de la transformación, primero en términos de ψ y luego en términos de η , no es otro que el de reducir el sistema de dos ecuaciones diferenciales parciales no lineales en 2 variables independiente (x, y) , a una sola ecuación diferencial, que si bien sigue siendo no lineal, está en términos de una sola variable independiente η .

$$\left. \begin{matrix} u_{(x,y)} \\ v_{(x,y)} \end{matrix} \right\} \Rightarrow \psi_{(x,y)} \Rightarrow \psi(\eta) \Rightarrow f(\eta) \quad (\text{Ec } 4.9)$$

Después de considerable algebra es posible establecer la función de similitud f y sus derivadas, relacionándolas con las variables primitivas mediante las ecuaciones 4.10, 4.11, y 4.12, mientras que las ecuaciones de conservación de masa y momentum en x pueden reducirse a la ecuación 4.13, conocida como la ecuación de Blasius. Resolviendo de forma numérica dicha ecuación, es posible calcular los valores de f, f' y f'' en función de η , como se muestra en la Tabla 11. Los datos aquí mostrados son netamente demostrativos, el set de datos original para resolver la función de similitud utiliza un malla para η con un espaciamiento de 0.0001, equivalente a 100.001 nodos, el código para la solución numérica de dicha ecuación se presenta como anexo no impreso.

$$f_{(\eta)} = \frac{\partial f_{(\eta)}}{\partial \eta} = \frac{\psi}{\sqrt{\nu U_{\alpha} x}} \quad (\text{Ec } 4.10)$$

$$f'_{(\eta)} = \frac{\partial f_{(\eta)}}{\partial \eta} = \frac{u}{U_{\alpha}} = \text{perfil de velocidad} \quad (\text{Ec } 4.11)$$

$$f''_{(\eta)} = \frac{\partial^2 f_{(\eta)}}{\partial \eta^2} = \frac{\partial \left(\frac{u}{U_{\alpha}} \right)}{\partial \eta} = \text{gradiente de la velocidad} \quad (\text{Ec } 4.12)$$

$$ff'' + f''' = 0 \quad (\text{Ec } 4.13)$$

Los resultados para f' mostrados en la Tabla 11 son graficados en función de η en la Figura 17, donde se puede apreciar que f' es asintótica a 1, alcanzando el valor de 0.99 en aproximadamente $\eta = 5$. Interpolando en el set de datos original, el valor determinado fue 4.9099, el cual es utilizado en la ecuación 4.14 para definir el espesor de la capa límite hidrodinámica en función de la distancia medida desde la entrada, la viscosidad y la velocidad de la corriente no perturbada. Por otro lado, el espesor de la capa límite térmica es expresado en términos del espesor de la capa límite hidrodinámica y el número adimensional de Prandtl como se muestra en la ecuación 4.15.

Figura 17. Solución de Blasius para la ecuación de la capa límite hidrodinámica.

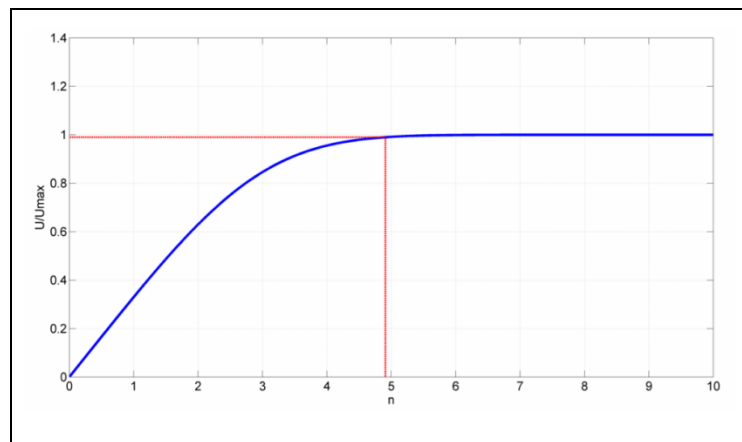


Tabla 11. Solución numérica de la ecuación de Blasius

n	f	f'	f''
0.1	0.00166028	0.03287346	0.33204815
0.2	0.006641	0.06607581	0.33198384
0.3	0.01494146	0.09926679	0.33180935
0.4	0.02655988	0.13243269	0.33146984
0.5	0.04149282	0.16555434	0.33091095
0.6	0.05973464	0.19860717	0.33007912
0.8	0.10610822	0.26438174	0.32738925
1	0.16557173	0.32945701	0.32300709
1.2	0.23794872	0.39345949	0.31658916
1.4	0.32298157	0.45595386	0.30786536
1.6	0.42032077	0.51646007	0.29666343
1.8	0.52951804	0.57447516	0.28293099
2	0.65002437	0.62949892	0.26675152
2.2	0.78119333	0.68106195	0.24835089
2.4	0.92229012	0.72875376	0.22809174
2.6	1.07250597	0.77224848	0.20645461
2.8	1.23097729	0.81132553	0.18400659
3	1.39680821	0.84588299	0.16136032
3.5	1.83769857	0.91293253	0.10777266
4	2.30574639	0.95545394	0.06423415
4.5	2.79013432	0.97948027	0.03398091
5	3.28327363	0.99152597	0.01590682
5.5	3.78057185	0.99687223	0.0065786
6	4.27962088	0.99897047	0.00240205
6.5	4.77932229	0.99969829	0.00077411
7	5.27923877	0.99992139	0.00022017
8	6.2792134	0.99999626	1.2241E-05
9	7.27921234	0.99999989	0
10	8.27921231	0	0

$$\delta = 4.9099 \sqrt{\frac{\nu z}{U_\alpha}} = 4.9099 \sqrt{Re_x} \quad (\text{Ec } 4.14)$$

$$\delta/\delta_T = Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Ec } 4.15)$$

Para la solución numérica de la capa límite se escogió el aire como fluido, una velocidad de corriente libre de 1 [m/s] y una placa plana de longitud 8 [m]. La temperatura de entrada del fluido es 298 [K] mientras que la temperatura de la placa es 398 [K]. Todas las propiedades son consideradas constantes y fueron determinadas a la temperatura de entrada del fluido; La densidad es igual a 1.173 [Kg/m³], la viscosidad es igual a 1.858e-5 [Kg/m-s] y el calor específico es igual a 1.007 [KJ/Kg-K].

Para la discretización de las ecuaciones se utilizaron 40x70 volúmenes de control en la malla no desplazada, y para la solución se utilizó un algoritmo transitorio implícito. Al igual que el problema “Lid-Driven Cavity” y los ejemplos de validación que se presentarán más adelante, este problema puede resolverse utilizando la interfaz gráfica desarrollada; la Figura 18 y la Figura 19 muestran respectivamente la ventana con todos los parámetros del problema y la ventana de resultados. Las condiciones de fronteras y las curvas de nivel para la componente horizontal de la velocidad se muestran en la Figura 20 junto con las condiciones de frontera del modelo.

Figura 18. Interfaz gráfica para la solución de la capa límite sobre una placa plana.

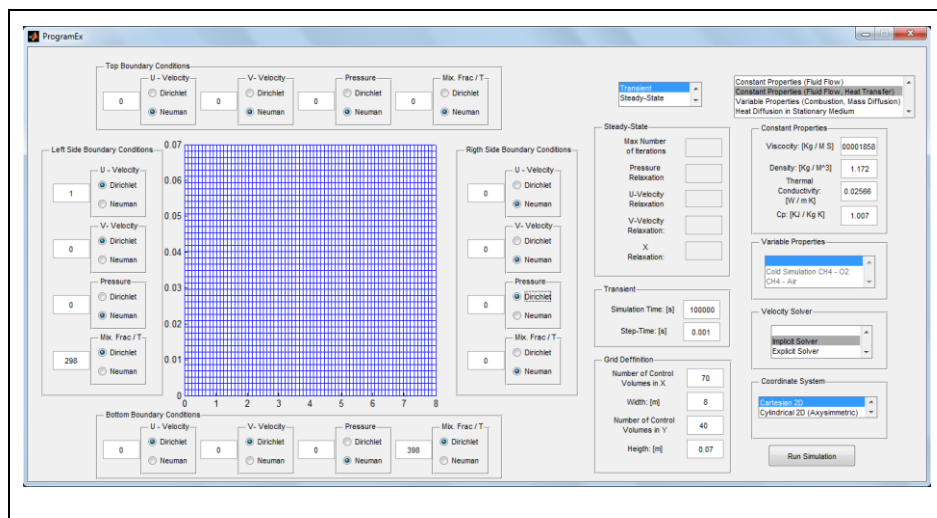


Figura 19. Pantalla de resultados de la interfaz gráfica, para la solución de la capa límite sobre una placa plana.

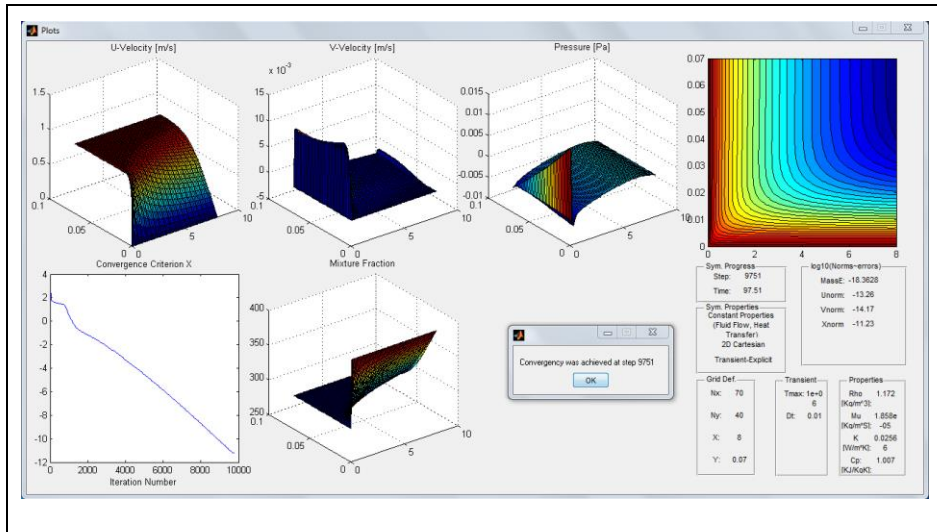


Figura 20. Capa límite para una placa plana.

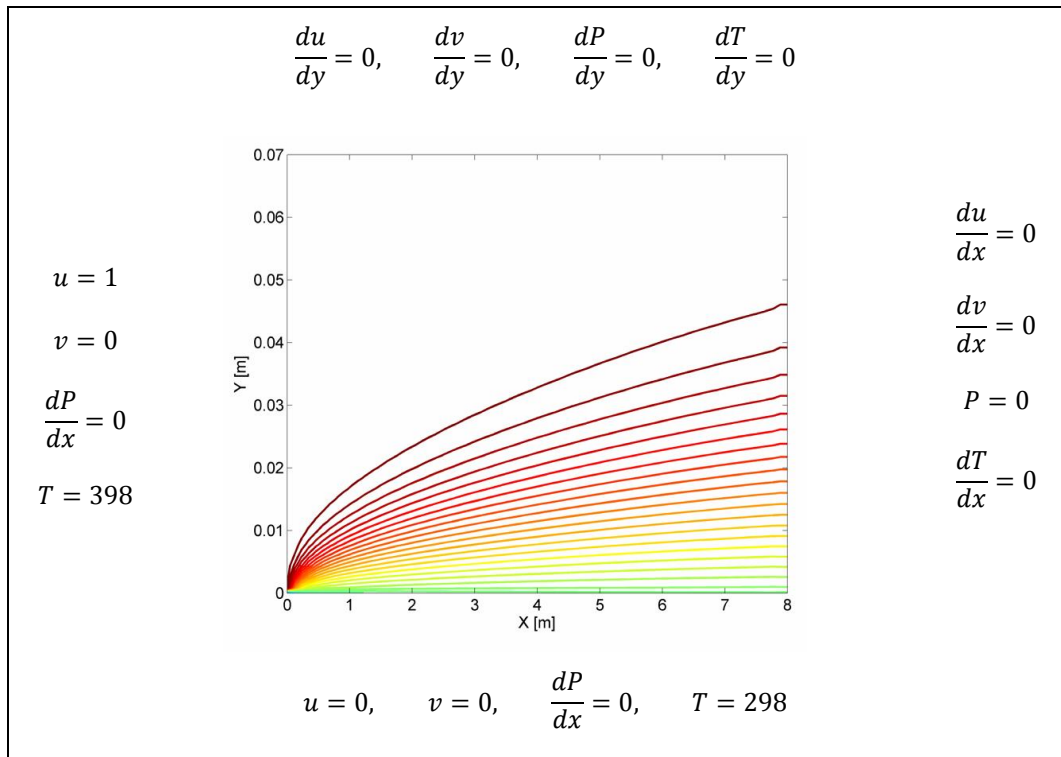


Figura 21. Validación del espesor de la capa límite hidrodinámica sobre una placa plana.

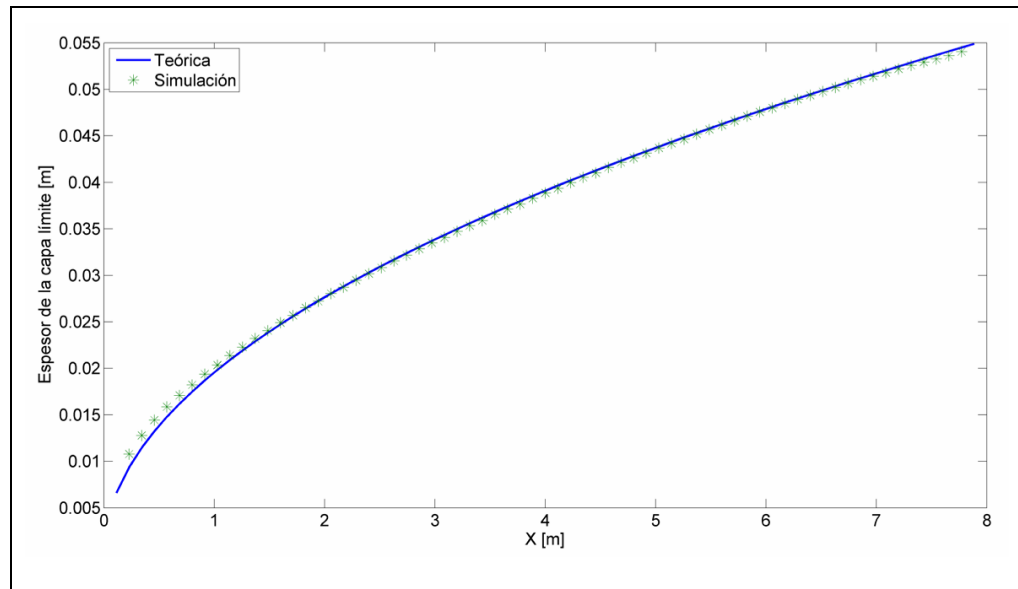


Figura 22. Validación del espesor de la capa límite térmica sobre una placa plana.

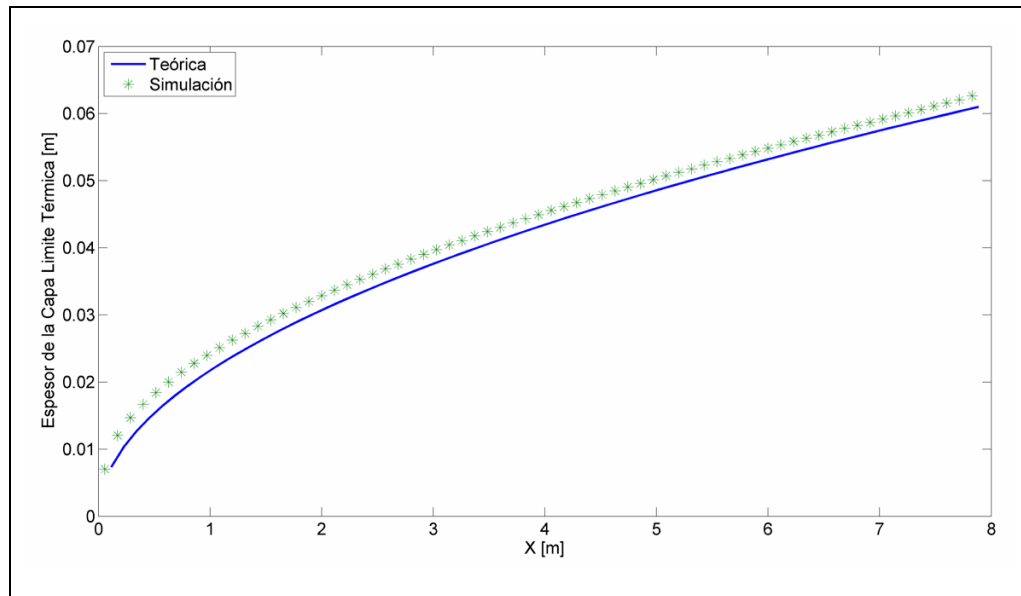


Tabla 12. Espesor de la capa límite hidrodinámica para una placa plana.

X [m]	Capa límite: teórica	Capa límite: simulación	% Error	Reynolds	X [m]	Capa límite: teórica	Capa límite: simulación	% Error	Reynolds	X [m]	Capa límite: teórica	Capa límite: simulación	% Error	Reynolds
0.2286	0.0093	0.0108	16.13	1.44E+04	2.9714	0.0337	0.0335	0.59	1.87E+05	5.7143	0.0467	0.0466	0.21	3.60E+05
0.3429	0.0114	0.0128	12.28	2.16E+04	3.0857	0.0343	0.0341	0.58	1.95E+05	5.8286	0.0472	0.0471	0.21	3.68E+05
0.4571	0.0132	0.0144	9.09	2.88E+04	3.2	0.035	0.0347	0.86	2.02E+05	5.9429	0.0477	0.0476	0.21	3.75E+05
0.5714	0.0148	0.0159	7.43	3.60E+04	3.3143	0.0356	0.0354	0.56	2.09E+05	6.0571	0.0481	0.048	0.21	3.82E+05
0.6857	0.0162	0.0171	5.56	4.33E+04	3.4286	0.0362	0.0359	0.83	2.16E+05	6.1714	0.0486	0.0485	0.21	3.89E+05
0.8	0.0175	0.0182	4.00	5.05E+04	3.5429	0.0368	0.0366	0.54	2.23E+05	6.2857	0.049	0.0489	0.20	3.96E+05
0.9143	0.0187	0.0194	3.74	5.77E+04	3.6571	0.0374	0.0371	0.80	2.31E+05	6.4	0.0495	0.0494	0.20	4.04E+05
1.0286	0.0198	0.0203	2.53	6.49E+04	3.7714	0.038	0.0377	0.79	2.38E+05	6.5143	0.0499	0.0498	0.20	4.11E+05
1.1429	0.0209	0.0214	2.39	7.21E+04	3.8857	0.0385	0.0383	0.52	2.45E+05	6.6286	0.0503	0.0502	0.20	4.18E+05
1.2571	0.0219	0.0223	1.83	7.93E+04	4	0.0391	0.0389	0.51	2.52E+05	6.7429	0.0508	0.0506	0.39	4.25E+05
1.3714	0.0229	0.0232	1.31	8.65E+04	4.1143	0.0397	0.0394	0.76	2.60E+05	6.8571	0.0512	0.051	0.39	4.33E+05
1.4857	0.0238	0.0241	1.26	9.37E+04	4.2286	0.0402	0.04	0.50	2.67E+05	6.9714	0.0516	0.0514	0.39	4.40E+05
1.6	0.0247	0.0249	0.81	1.01E+05	4.3429	0.0407	0.0405	0.49	2.74E+05	7.0857	0.052	0.0518	0.38	4.47E+05
1.7143	0.0256	0.0257	0.39	1.08E+05	4.4571	0.0413	0.041	0.73	2.81E+05	7.2	0.0525	0.0522	0.57	4.54E+05
1.8286	0.0264	0.0265	0.38	1.15E+05	4.5714	0.0418	0.0416	0.48	2.88E+05	7.3143	0.0529	0.0526	0.57	4.61E+05
1.9429	0.0272	0.0272	0.00	1.23E+05	4.6857	0.0423	0.0421	0.47	2.96E+05	7.4286	0.0533	0.0529	0.75	4.69E+05
2.0571	0.028	0.028	0.00	1.30E+05	4.8	0.0428	0.0426	0.47	3.03E+05	7.5429	0.0537	0.0533	0.74	4.76E+05
2.1714	0.0288	0.0287	0.35	1.37E+05	4.9143	0.0433	0.0432	0.23	3.10E+05	7.6571	0.0541	0.0536	0.92	4.83E+05
2.2857	0.0296	0.0295	0.34	1.44E+05	5.0286	0.0438	0.0437	0.23	3.17E+05	7.7714	0.0545	0.0541	0.73	4.90E+05
2.4	0.0303	0.0302	0.33	1.51E+05	5.1429	0.0443	0.0442	0.23	3.24E+05					
2.5143	0.031	0.0308	0.65	1.59E+05	5.2571	0.0448	0.0446	0.45	3.32E+05					
2.6286	0.0317	0.0315	0.63	1.66E+05	5.3714	0.0453	0.0452	0.22	3.39E+05					
2.7429	0.0324	0.0322	0.62	1.73E+05	5.4857	0.0458	0.0457	0.22	3.46E+05					
2.8571	0.033	0.0328	0.61	1.80E+05	5.6	0.0463	0.0461	0.43	3.53E+05					

Tabla 13. Espesor de la capa límite térmica para una placa plana.

X [m]	capa límite: teórica	capa límite: simulación	% error	Reynolds	X [m]	capa límite: teórica	capa límite: simulación	% error	Reynolds	X [m]	capa límite: teórica	capa límite: simulación	% error	Reynolds
0.2286	0.0103	0.0136	31.61	1.44E+04	2.9714	0.0374	0.0399	6.56	1.87E+05	5.7143	0.0519	0.0542	4.45	3.60E+05
0.3429	0.0127	0.016	26.32	2.16E+04	3.0857	0.0381	0.0406	6.53	1.95E+05	5.8286	0.0524	0.0547	4.30	3.68E+05
0.4571	0.0147	0.0179	22.05	2.88E+04	3.2	0.0389	0.0412	5.94	2.02E+05	5.9429	0.0530	0.0552	4.15	3.75E+05
0.5714	0.0164	0.0195	18.58	3.60E+04	3.3143	0.0396	0.0419	5.93	2.09E+05	6.0571	0.0534	0.0558	4.41	3.82E+05
0.6857	0.0180	0.021	16.67	4.33E+04	3.4286	0.0402	0.0426	5.91	2.16E+05	6.1714	0.0540	0.0563	4.26	3.89E+05
0.8	0.0194	0.0224	15.20	5.05E+04	3.5429	0.0409	0.0432	5.65	2.23E+05	6.2857	0.0544	0.0567	4.14	3.96E+05
0.9143	0.0208	0.0237	14.06	5.77E+04	3.6571	0.0416	0.0439	5.64	2.31E+05	6.4	0.0550	0.0572	4.00	4.04E+05
1.0286	0.0220	0.0249	13.18	6.49E+04	3.7714	0.0422	0.0445	5.39	2.38E+05	6.5143	0.0554	0.0577	4.07	4.11E+05
1.1429	0.0232	0.026	11.96	7.21E+04	3.8857	0.0428	0.0452	5.66	2.45E+05	6.6286	0.0559	0.0582	4.14	4.18E+05
1.2571	0.0243	0.0271	11.37	7.93E+04	4	0.0434	0.0458	5.42	2.52E+05	6.7429	0.0564	0.0587	4.00	4.25E+05
1.3714	0.0254	0.0282	10.83	8.65E+04	4.1143	0.0441	0.0464	5.19	2.60E+05	6.8571	0.0569	0.0592	4.06	4.33E+05
1.4857	0.0264	0.0292	10.42	9.37E+04	4.2286	0.0447	0.047	5.22	2.67E+05	6.9714	0.0573	0.0597	4.13	4.40E+05
1.6	0.0274	0.0301	9.68	1.01E+05	4.3429	0.0452	0.0476	5.26	2.74E+05	7.0857	0.0578	0.0601	4.02	4.47E+05
1.7143	0.0284	0.0311	9.34	1.08E+05	4.4571	0.0459	0.0482	5.04	2.81E+05	7.2	0.0583	0.0606	3.89	4.54E+05
1.8286	0.0293	0.032	9.09	1.15E+05	4.5714	0.0464	0.0488	5.07	2.88E+05	7.3143	0.0588	0.0611	3.95	4.61E+05
1.9429	0.0302	0.0328	8.53	1.23E+05	4.6857	0.0470	0.0493	4.89	2.96E+05	7.4286	0.0592	0.0616	4.02	4.69E+05
2.0571	0.0311	0.0337	8.32	1.30E+05	4.8	0.0476	0.0499	4.93	3.03E+05	7.5429	0.0597	0.0621	4.08	4.76E+05
2.1714	0.0320	0.0345	7.81	1.37E+05	4.9143	0.0481	0.0505	4.97	3.10E+05	7.6571	0.0601	0.0626	4.14	4.83E+05
2.2857	0.0329	0.0353	7.33	1.44E+05	5.0286	0.0487	0.051	4.79	3.17E+05	7.7714	0.0606	0.0632	4.37	4.90E+05
2.4	0.0337	0.0361	7.23	1.51E+05	5.1429	0.0492	0.0516	4.83	3.24E+05					
2.5143	0.0344	0.0369	7.13	1.59E+05	5.2571	0.0498	0.0521	4.67	3.32E+05					
2.6286	0.0352	0.0377	7.03	1.66E+05	5.3714	0.0503	0.0527	4.70	3.39E+05					
2.7429	0.0360	0.0384	6.67	1.73E+05	5.4857	0.0509	0.0532	4.54	3.46E+05					
2.8571	0.0367	0.0391	6.64	1.80E+05	5.6	0.0514	0.0537	4.38	3.53E+05					

Analizando la Tabla 12 junto con la Figura 21, se puede concluir que el modelo replica satisfactoriamente el espesor de la capa límite hidrodinámica sobre una placa plana. Se encuentra que los errores decrecen con la longitud, cayendo por debajo del 5% después de los primeros 50 [cm] de la placa. Una mejor aproximación podría obtenerse utilizando una malla refinada en la frontera izquierda del dominio, ya que allí se presentan los gradientes más grandes en la velocidad y por ende el problema es más sensible a los errores debidos a la difusividad numérica. Los errores al inicio de la placa también son atribuibles a la inaplicabilidad de la solución teórica para números de Reynolds bajos. Se debe aclarar que la solución analítica para la capa límite no es una solución exacta, por el contrario, al igual que la solución utilizando CFD, ambas resultan ser una buena aproximación al comportamiento real del fluido y por lo tanto las dos soluciones deben coincidir.

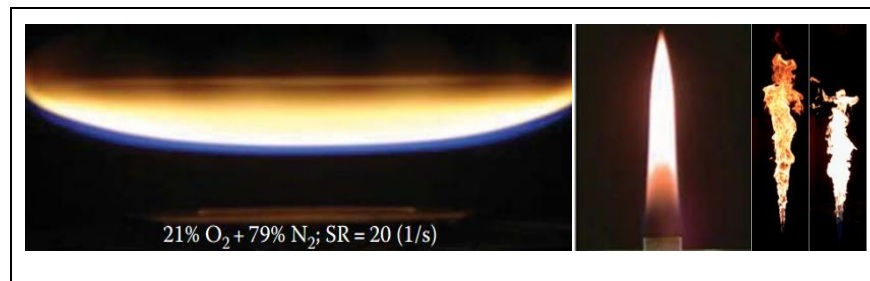
$$\theta = \frac{T - 298}{398 - 298} \quad (\text{Ec } 4.16)$$

Para la determinación de la capa límite térmica se adimensionalizó la temperatura y se definió la capa límite como la iso-línea para $\theta = 0.01$. Analizando la Tabla 13 junto con la Figura 22 se puede notar que los errores en el espesor de la capa límite térmica son mucho mayores que los errores en la capa límite hidrodinámica, esto se debe a que el perfil de temperatura es dependiente del campo de flujo y por ende los errores en este último son amplificados en el otro. La capa límite térmica obtenida mediante la simulación replica razonablemente la forma de la capa límite predicha teóricamente, sin embargo, esta parece estar desplazada verticalmente aproximadamente 2 [mm]. Respecto a los errores relativos, estos rondan el 10% en promedio para la primera mitad de la placa, cayendo por debajo del 5% para la segunda mitad de la placa.

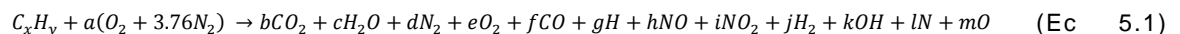
5. MODELO “MIXED-IS-BURNT”

Una llama puede clasificarse de acuerdo a múltiples parámetros; esta puede ser laminar o turbulenta de acuerdo al régimen de flujo dominante, también puede clasificarse como premezclada, parcialmente premezclada o no premezclada (difusiva) dependiendo de la forma en que el oxidante y el combustible entran en contacto. Dependiendo si los flujos de oxidante y combustible son paralelos u opuestos también es posibles clasificarlas como llamas co-flow (paralelas) o counter-flow (a contra corriente). Otra clasificación puede hacerse de acuerdo al tipo de oxidante utilizado; el cual puede ser aire, aire enriquecido con oxígeno (oxygen-enhanced air) u oxígeno puro (oxy-fuel).

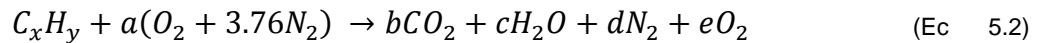
Figura 23. Fotografías de llamas: laminar a contracorriente (izquierda), laminar en flujo paralelo (centro) y turbulenta en flujo paralelo (derecha).



Cualquiera sea la configuración de la llama ésta implica la reacción exotérmica de óxido-reducción entre un combustible y un oxidante, la cual puede escribirse de forma general para cualquier hidrocarburo como se muestra en la ecuación 5.6, donde las letras minúsculas que acompañan cada especie son los coeficientes de balance y los subíndices x y y dependen del combustible.



La forma general de la reacción involucra 4 elementos (C, H, O, N) y 12 especies diferentes en los productos, por lo que no resulta de gran utilidad ya que no puede balancearse para determinar todos los coeficientes. Sin embargo, la reacción general puede simplificarse al considerar solo las especies mayores, ignorando todos los radicales (O, H, N, OH), y considerando que todo el combustible es consumido sin formar productos como CO, NO, H_2 o NO_2 . Esta reacción simplificada se muestra en la ecuación 5.2.



El coeficiente a que acompaña al oxidante equivale al número de moles de aire requeridas para que un mol de combustible reaccione completamente, este se determina según la ecuación 5.3, donde x es el número de carbonos y y es el número de hidrógenos en la molécula de combustible.

$$a = x + \frac{y}{4} \quad (\text{Ec } 5.3)$$

La relación aire combustible A/F es el cociente entre el número de moles o gramos de aire y el número de moles o gramos de combustible. A pesar de ser un número adimensional, sus unidades de acuerdo con su definición son $^{[N_{aire}]} / [N_{CH_4}]$, o $^{[g_{aire}]} / [g_{CH_4}]$ según corresponda. Para la combustión estequiométrica de metano los valores en moles y gramos son 9.52 y 10.58 respectivamente.

$$A/F|_{\text{mol, estequimetrica}} = \frac{N_{\text{Aire}}}{N_{\text{Combustible}}} = \frac{9.52 [N_{\text{aire}}]}{1 [N_{CH_4}]} = 9.52 \quad (\text{Ec } 5.4)$$

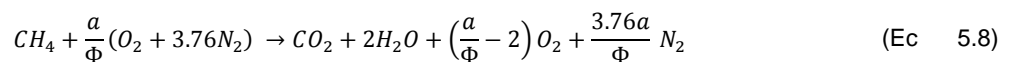
$$A/F|_{\text{masa, estequimetrica}} = \frac{M_{\text{Aire}}}{M_{\text{Combustible}}} = \frac{169.28 [g_{\text{aire}}]}{16 [g_{CH_4}]} = 10.58 \quad (\text{Ec } 5.5)$$

La relación de equivalencia en la ecuación 5.6 se define como el cociente entre la relación aire-combustible estequiométrica y la relación aire-combustible real, y en función de esta pueden definirse 3 tipos de mezclas entre el combustible y el comburente; rica, estequiométrica y diluida, como se muestra a continuación.

$$\Phi = \frac{A/F|_{est}}{A/F|_{real}} \quad (\text{Ec } 5.6)$$

$$\Phi \begin{cases} < 1 & \text{mezcla diluida, exceso de } O_2 \\ = 1 & \text{mezcla estequiométrica} \\ > 1 & \text{mezcla rica, deficit de } O_2 \end{cases} \quad (\text{Ec } 5.7)$$

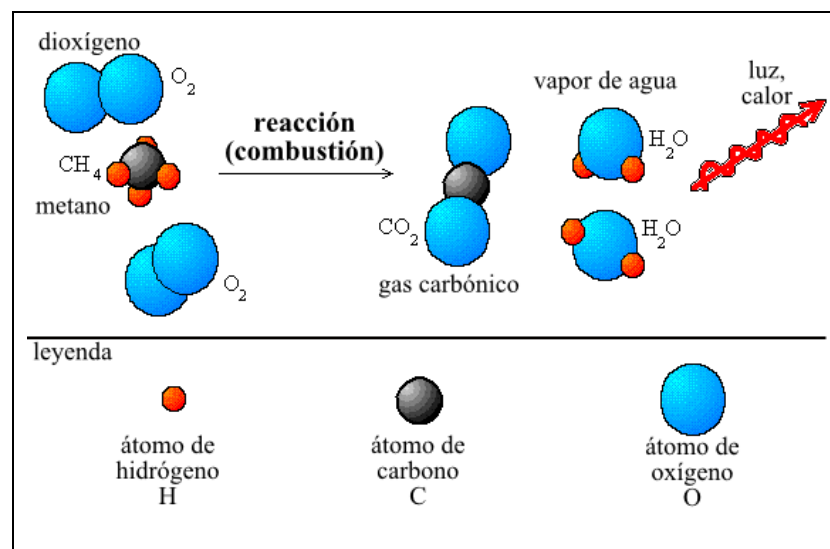
Φ a diferencia de A/F tiene un valor único sin importar si es calculado en base molar o másica y este puede usarse para definir la ecuación 5.8 como una forma más general de la ecuación 5.2 para la combustión de mezclas diluidas y estequiométrica de metano, esta ecuación no contempla los productos de combustión de mezclas ricas ya que estos no pueden determinarse solamente a partir del principio de conservación de las especies, para ello se requiere invocar el principio de equilibrio químico (segunda ley de la termodinámica). La forma estequiométrica ($\Phi = 1$) de la reacción 5.8 involucra la combustión de 1 mol de metano con 9.52 moles de aire para producir 1 mol de dióxido de carbono, 2 moles de vapor de agua y 7.52 moles de nitrógeno.



Si bien las reacciones que se presentan en las ecuaciones 5.1, 5.2 y 5.8 son de gran utilidad para estimar las concentraciones de las especies y determinar la temperatura de llama adiabática describiendo globalmente la combustión del metano, estas son idealización del mecanismo de reacción que realmente actúa para transformar los reactivos en productos. Esto se evidencia en primer lugar en

la presencia de coeficientes de reacción decimales; considerando que el átomo es indivisible, una reacción real solo podría involucrar coeficientes enteros. En segundo lugar, una reacción involucrando la colisión entre una molécula de combustible, 2 de oxígeno y 7.52 de nitrógeno de forma simultánea es imposible, debido a la ínfima posibilidad de que 10.52 moléculas colisionen simultáneamente, y en el caso de que esto sucediera, el número de enlaces que deberían romperse para que la reacción se dé es simplemente demasiado alto. Como norma general una reacción química en estado gaseoso involucra como máximo la colisión de 3 moléculas simultáneamente [22].

Figura 24. Esquema de enlaces para la combustión del metano.



Fuente: <http://en.wikipedia.org/wiki/Combustion>

En el capítulo 2 se introdujeron las ecuaciones de transporte para las cantidades escalares relevantes al estudio de un flujo reactivo, entre ellas la ecuación de conservación para cada especie química presente en el flujo, estas se muestran en la Tabla 14 para las 5 especies mayores contempladas en la ecuación 5.2.

Como se puede apreciar, la ecuación de conservación para cada especie involucra la determinación del coeficiente de difusión de masa D_i , al igual que el término fuente w_i . Este último corresponde a la velocidad de formación o destrucción de dicha especie. Tanto D_i como w_i deben definirse para cada punto del dominio.

Tabla 14: Ecuaciones de conservación para las 5 especies mayores

Especie	Ecuación de conservación
CH_4	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{CH_4}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{CH_4}) = \nabla \cdot (\rho D_{CH_4} \nabla Y_{CH_4}) + w_{CH_4}$
O_2	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{O_2}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{O_2}) = \nabla \cdot (\rho D_{O_2} \nabla Y_{O_2}) + w_{O_2}$
CO_2	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{CO_2}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{CO_2}) = \nabla \cdot (\rho D_{CO_2} \nabla Y_{CO_2}) + w_{CO_2}$
H_2O	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{H_2O}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{H_2O}) = \nabla \cdot (\rho D_{H_2O} \nabla Y_{H_2O}) + w_{H_2O}$
N_2	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{N_2}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{N_2}) = \nabla \cdot (\rho D_{N_2} \nabla Y_{N_2}) + w_{N_2}$

La velocidad de reacción puede entenderse como la contribución de las reacciones químicas (no debida a la acción de los mecanismos de transporte) a la variación en la concentración de cada especie química en el tiempo. Las unidades son usualmente $\left[\frac{mol}{m^3 s}\right]$, o su equivalente $\left[\frac{Kg}{m^3 s}\right]$, aunque estas varían dependiendo del orden de la reacción.

Cada reacción química en un tiempo dado tiene lugar a una velocidad específica, mientras que las ratas de formación o destrucción de cada una de las especies involucradas en esta se calculan a partir de los coeficientes de balance de masas para la reacción.

La velocidad con la que una reacción química ocurre es una función de 1) la concentración de los reactivos, 2) la temperatura, 3) la presión, 4) la presencia de catalizadores o inhibidores, y 5) los efectos de radiación. La velocidad de reacción puede modelarse de forma simplificada utilizando la ley de Arrhenius modificada, la cual se muestra en la ecuación 5.9. Donde R_u es la constante universal de los gases, AT^b representa la frecuencia de colisión y el término exponencial se denomina el factor de Boltzman el cual representa la fracción de las colisiones que tienen un nivel de energía mayor a la energía de activación E_a . Los parámetros A , b y E_a para una reacción química específica no son función de la concentración ni de la temperatura, son constantes pre determinadas disponibles en la literatura. En la Figura 25 se presenta una porción del mecanismo de reacción GRI, donde puede apreciarse que cada reacción química es acompañada por los 3 parámetros mencionados.

$$k = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) \quad (\text{Ec } 5.9)$$

Un mecanismo de reacción es el conjunto de reacciones químicas “paso-a-paso” que sigue un combustible en su proceso de oxidación, junto con los parámetros de Arrhenius asociados a cada reacción necesarios para calcular las velocidades de formación de productos y destrucción de reactivos. Múltiples mecanismos de reacción están disponibles en la literatura, algunos son libres como GRI [11], y otros hacen parte de paquetes comerciales como es el caso de CHEMKIN [12]. Existen también mecanismos simplificados que bajo condiciones específicas representan la dinámica del proceso utilizando un menor número de ecuaciones y de especies químicas, este es el caso del mecanismo mostrado en la Figura 26, que involucra solo 8 especies y 5 reacciones [23].

GRI es un mecanismo de reacción para hidrocarburos de hasta dos carbonos en su cadena (C2). Este fue desarrollado por el “Gas Research Institute” y en su última versión consta de 325 reacciones involucrando 53 especies químicas diferentes (Figura 25). Por otro lado, CHEMKIN es el acrónimo de Chemical

Kinetics y más que un mecanismo de reacción, empezó como una colección de códigos para el cálculo de propiedades termo-físicas para flujos reactivos en Sandia National Laboratory en 1970. Actualmente CHEMKIN ReactionDesign es una marca comercial que ofrece software al igual que una extensa base de datos útil para la simulación de flujos reactivos, y algunos de sus productos hacen parte del paquete Ansys-Fluent. CHEMKIN es el software comercial más robusto desarrollado hasta la fecha que permite desarrollar mecanismos de reacción específicos para un problema en particular.

Figura 25. Mecanismo de reacción GRI

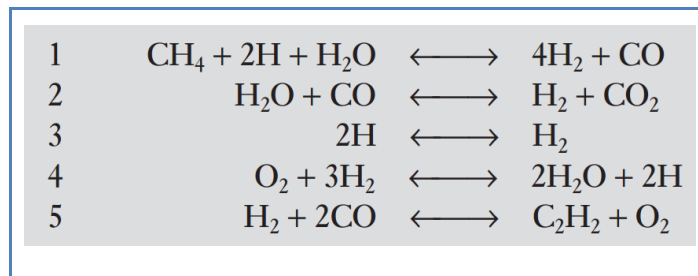
```

GRI: Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda
! GRI-Mech version 3.0 7/30/99 CHEMKIN-II format
! See README30 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;
! worldwide web home page http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ or
! through http://www.gri.org under 'Basic Research'
! For additional information, contacts, and disclaimer'
ELEMENTS
O H C N AR
END
SPECIES
H2 O O2 OH H2O HO2 H2O2
C CH CH2 CH2(S) CH3 CH4 CO CO2
HCO CH2O CH2OH CH3O CH3OH C2H C2H2 C2H3
C2H4 C2H5 C2H6 HCCO CH2CO HCCOH N NH
NH2 NH3 NNH NO NO2 N2O HNO CN
HCN H2CN HCNH HCNH HNCN HNCN
AR C3H7 C3H8 CH2CHO CH3CHO
END
!THERMO
! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file
END
REACTIONS
2O+M<=>O2+M
H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/
O+H+M<=>OH+M 5.000E+17 -1.000 .00
O+H2<=>HOH 3.870E+04 2.700 6260.00
O+HO2<=>OH+O2 2.000E+13 .000 .00
O+H2O2<=>OH+HO2 9.630E+06 2.000 4000.00
O+CH<=>H+CO 5.700E+13 .000 .00
O+CH2<=>H+HCO 8.000E+13 .000 .00
O+CH2(S)<=>H+HCO 1.500E+13 .000 .00
O+CH2(S)<=>H+HCO 1.500E+13 .000 .00
O+CH3<=>H+CH2O 5.060E+13 .000 .00
O+CH4<=>OH+CH3 1.020E+09 1.500 8600.00
O+CO(+M)<=>CO2(+M) 1.800E+10 .000 2385.00
LOW/ 6.020E+14 .000 3000.00/
H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/ AR/ .50/
O+HCO<=>OH+CO 3.000E+13 .000 .00
O+HCO<=>H+CO2 3.000E+13 .000 .00
O+CH2O<=>OH+HCO 3.900E+13 .000 3540.00
O+CH2OH<=>OH+CH2O 1.000E+13 .000 .00
O+CH3O<=>OH+CH2O 1.000E+13 .000 .00
O+CH3OH<=>OH+CH2OH 3.880E+05 2.500 3100.00
O+CH3OH<=>OH+CH3O 1.300E+05 2.500 5000.00
O+C2H<=>C+H+CO 5.000E+13 .000 .00
O+C2H2<=>H+HCCO 1.350E+07 2.000 1900.00
O+C2H2<=>OH+C2H 4.600E+19 -1.410 28950.00
O+C2H2<=>CO+CH2 6.940E+06 2.000 1900.00

```

Fuente:

Figura 26. Mecanismo de reacción reducido



Fuente: [23]

La complejidad de un mecanismo se mide en el número de reacciones involucradas y es principalmente función de la longitud de la molécula de combustible. Un mecanismo complejo tiende a representar mejor la dinámica de la reacción global, sin embargo, al involucrar un mayor número de especies químicas incrementa razonablemente el costo computacional de la simulación. Es importante recalcar que un mecanismo de reacción no es una ley ni un principio físico, es más bien una representación cuantitativa simplificada de un proceso que no ha sido completamente entendido, y por lo tanto es posible encontrar en la literatura gran diversidad de mecanismos para un mismo combustible, sin que pueda decirse que uno es mejor que otro en todos los aspectos.

El segundo término que debe calcularse es el coeficiente de difusión de masa, el cual es necesario para cuantificar los flujos másicos de cada especie debidos a la acción de los gradientes de concentración. La teoría cinética de gases proporciona una buena aproximación para la estimación de las propiedades de gases ideales, el coeficiente de difusión de masa entre estas, sin embargo esta solo se extiende a mezclas binarias.

El coeficiente utilizado en las ecuaciones de la Tabla 14 corresponde al coeficiente de difusión de cada especie, individualmente, contra todas las demás presentes en la mezcla. Para la determinación de dicho coeficiente existen varias correlaciones teóricas y empíricas como las utilizadas por CHEMKIN [13], sin embargo estas resultan bastante costosas en términos computacionales.

El desarrollo de un modelo está siempre sujeto a la dualidad complejidad / precisión. Si bien un modelo complejo puede ser capaz de representar un fenómeno de forma muy precisa, este puede resultar muy costoso en términos de los requerimientos para su implementación, puede requerir de técnicas matemáticas complejas o ser computacionalmente muy costoso para los equipos disponibles, incluso puede presentar dificultades para la obtención de los parámetros de entrada. La simplificación razonable y justificada de un modelo, aun

cuando conlleva sacrificar cierta precisión, es una práctica común en aras de obtener resultados de forma más práctica y económica.

A diferencia de los modelos completos involucrando mecanismos de reacción detallados, el modelo “Infinitely fast chemistry” se basa en la hipótesis de que las reacciones químicas ocurren de forma inmediata, tan pronto como los reactivos para la misma estén disponibles. En el caso de la combustión de una llama no-premezclada esto significa que el oxígeno y el metano no coexisten en ningún punto del dominio, ya que tan pronto entran en contacto se transforman en productos hasta que se agote el reactivo límite, en una reacción que es considerada irreversible. Esta hipótesis también conocida como el modelo “mixed-is-burnt” [24] es la base de este proyecto ya que permite simplificar el sistema de ecuaciones diferenciales parciales al excluir todas las especies intermedias al igual que los efectos de la cinética química.

Retomando la reacción global de combustión para un hidrocarburo con x átomos de carbono y y átomos de hidrógeno en su molécula (ecuación 5.10), pero esta vez considerando que todo hidrocarburo no consumido debido a la carencia de oxígeno estará presente en los productos guardando la misma estructura química, es posible desarrollar las ecuaciones de balance para cada elemento químico (Tabla 15) y presentarlas de forma matricial como se muestra en la ecuación 5.11.

Al observar la ecuación 5.11 es posible apreciar que sin las consideraciones del modelo “infinitely-fast-chemistry” el sistema de ecuaciones sería indeterminado ya que se tienen 5 incógnitas y solo 4 ecuaciones, sin embargo, al condicionar la existencia de combustible en los productos a la carencia absoluta de oxígeno y viceversa, el sistema en la ecuación 5.11 puede fraccionarse como se muestra en las ecuaciones 5.12, 5.13 y 5.14 para mezclas diluidas, ricas y estequiométricas respectivamente. El sistema de ecuaciones fraccionado está completamente determinado y es solucionable a diferencia del sistema de ecuaciones inicial.

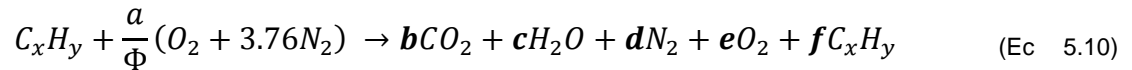


Tabla 15. Ecuaciones de balance de especies.

ELEMENTO	ECUACIÓN DE BALANCE
Carbono	$x = b + xf$
Oxígeno	$2\frac{a}{\Phi} = 2b + 2e + c$
Nitrógeno	$d = 3.76\frac{a}{\Phi}$
Hidrógeno	$y = 2c + yf$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & x \\ 1 & 1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & y \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ a/\Phi \\ 3.76a/\Phi \\ y \end{bmatrix} \quad (\text{Ec } 5.11)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b \\ c \\ d \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ a/\Phi \\ 3.76a/\Phi \\ y \end{bmatrix} \quad (\text{Ec } 5.12)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & x \\ 1 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & y \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b \\ c \\ d \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ a/\Phi \\ 3.76a/\Phi \\ y \end{bmatrix} \quad (\text{Ec } 5.13)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ a/\Phi \\ 3.76a/\Phi \end{bmatrix} \quad (\text{Ec } 5.14)$$

Nótese que para obtener la ecuación matricial 5.12 a partir de la ecuación 5.11, basta con cancelar la última columna de la matriz, correspondiente al combustible. De forma similar para la ecuación 5.13 basta con cancelar la columna número 4 correspondiente al oxígeno. Por último para la ecuación 5.14 para mezclas estequiométricas se debe cancelar tanto la columna correspondiente al combustible como la columna correspondiente al oxígeno.

Normalmente para describir una mezcla de gases con 5 componentes (CH_4, O_2, N_2, CO_2 y H_2O) es necesario conocer por lo menos la fracción másica de 4 de ellos, ya que la concentración del componente restante puede calcularse mediante la ecuación 5.15(a), donde Y_k se despeja de la ecuación 5.15(b) que es la misma ecuación de conservación de especies.

$$(a) Y_k = 1 - \sum_1^{k-1} Y_i, \quad (b) \sum_1^k Y_i = 1 \quad 5.15)$$

Como se mencionó anteriormente, la simplificación “mixed-is-burnt” permite describir los productos de combustión de un hidrocarburo utilizando un único parámetro, el cual puede ser una de las fracciones másicas o molares, la relación de equivalencia o cualquier otro parámetro adimensional de mezcla **para los reactivos**. Puede haber pasado inadvertido para el lector, pero las ecuaciones 5.12, 5.13 y 5.14 definen los productos de combustión únicamente en función de los reactivos y no de los productos en sí, ya que Φ considera solamente las especies CH_4, O_2 y N_2 sin incluir CO_2 ni H_2O .

Sin embargo, además de la no coexistencia entre oxígeno y combustible, el modelo “mixed-is-burnt” también asume que la reacción química es irreversible y esto significa que una vez formados los productos (CO_2, H_2O), estos no pueden reaccionar para formar ninguna otra especie, es decir, son considerados inertes y

en ese orden de ideas pueden agruparse con el nitrógeno introducido por el oxidante en una nueva especie denominada Y_{in} , de forma que las 5 especies son reducidas a 3; CH_4, O_2 e N_2 , y la definición de Φ es aplicable, ya sea que se considere la mezcla como “productos” o como “reactivos”.

$$Y_{in} = Y_{N_2} + Y_{CO_2} + Y_{H_2O} \quad (\text{Ec } 5.16)$$

La elección de un parámetro adimensional adecuado para describir la mezcla de gases es de gran importancia para la simplificación del sistema de ecuaciones mostrado en la Tabla 14. A continuación se grafican tanto los reactivos como los productos de combustión del metano en función de la fracción de combustible en los reactivos (Figura 27 y Figura 28), la relación de equivalencia Φ (Figura 29 y Figura 30), el parámetro adimensional de mezcla φ (Figura 31 y Figura 32) y la forma normalizada de este último denominada ξ (Figura 33 y Figura 34), en términos de moles (izquierda) y masa (derecha) para todas las figuras.

Figura 27. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la fracción de metano en los reactivos

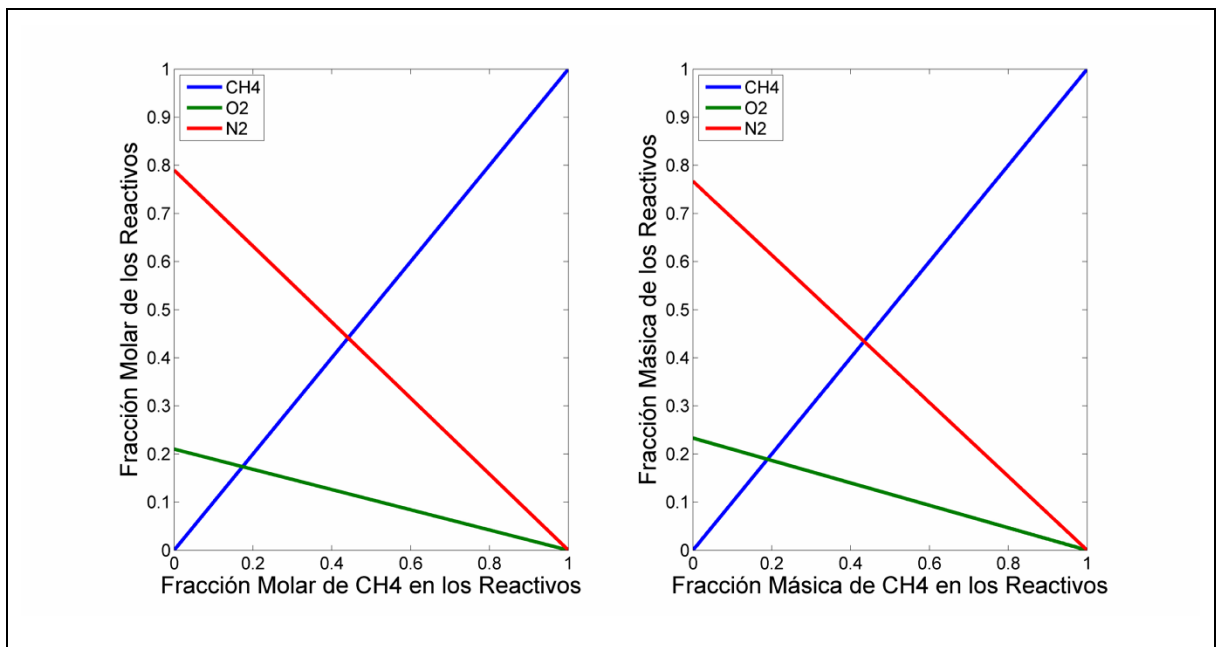
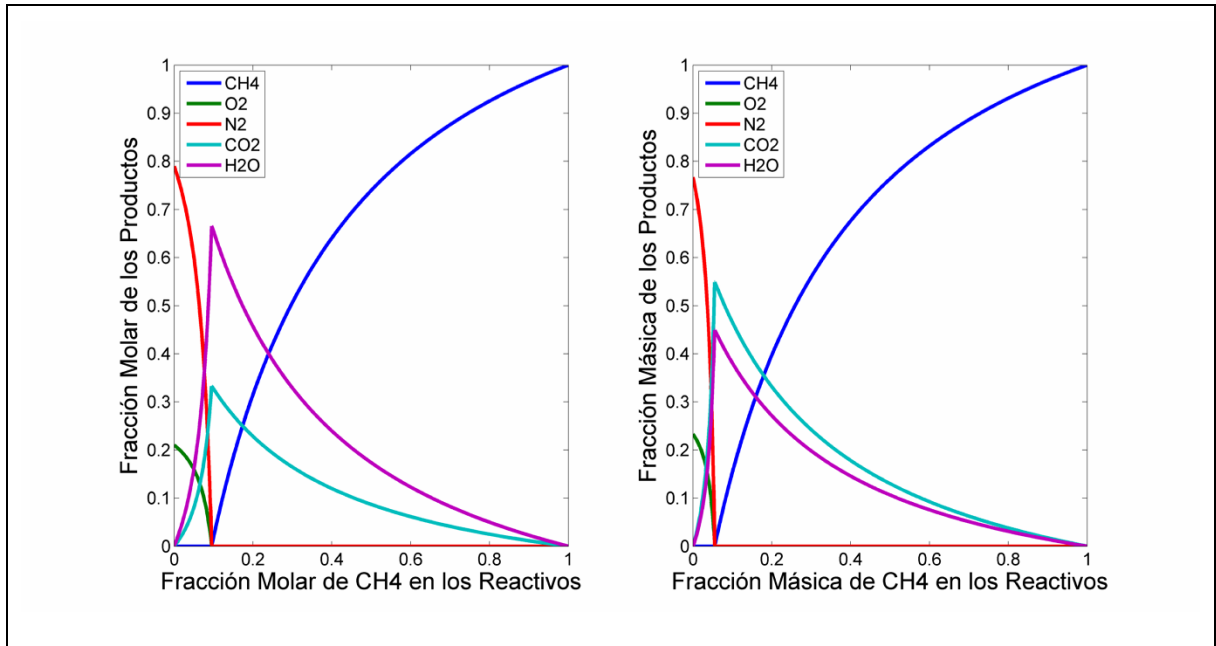


Figura 28. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la fracción de metano en los reactivos.



Utilizar la fracción de combustible en los productos como parámetro para describir la mezcla de gases no es una opción, ya que el parámetro seleccionado debe representar tanto a los productos como a los reactivos y en el caso de la fracción de combustible, esta no tiene el mismo valor en los productos que en los reactivos. La segunda opción es utilizar la relación de equivalencia ya que esta está en capacidad de definir ambas mezclas. Las funciones para determinar el número de moles de cada especie para las 3 condiciones de mezcla se muestran en la Tabla 16.

Para el cálculo de las concentraciones molares de cada especie basta con dividir cada una de estas por el número total de moles, el cual se muestra en la última fila de la tabla. Las funciones mostradas en la Tabla 16 están en base molar por simple conveniencia, sin embargo estas pueden expresarse fácilmente en términos de la masa al sustituir los valores de (a, x, y) en base molar por sus equivalentes en base másica.

Tabla 16. Productos de combustión en función de ϕ .

	Zona de mezcla rica (exceso de combustible)	Zona de mezcla estequiométrica	Zona de mezcla diluida (exceso de oxígeno)
	$\phi > 1$	$\phi = 1$	$\phi < 1$
N_{CH_4}	$\left(\frac{\phi - 1}{\phi}\right)$	0	0
N_{O_2}	0	0	$a\left(\frac{1 - \phi}{\phi}\right)$
N_{N_2}	$\frac{3.76a}{\phi}$	3.76a	$\frac{3.76a}{\phi}$
N_{H_2O}	$\frac{y}{2\phi}$	$\frac{y}{2}$	$\frac{y}{2}$
N_{CO_2}	$\frac{x}{\phi}$	x	x
$N_{totales}$	$\left(\frac{\phi - 1}{\phi}\right) + \frac{3.76a}{\phi} + \frac{y}{2\phi} + \frac{x}{\phi}$	$3.76a + \frac{y}{2} + x$	$a\left(\frac{1 - \phi}{\phi}\right) + \frac{3.76a}{\phi} + \frac{y}{2} + x$

Analizando la Figura 30 se puede apreciar que la relación de equivalencia toma el valor de cero cuando solo existe oxidante en la mezcla, sin embargo, en la condición límite de la mezcla donde solo existe combustible la relación de equivalencia tiende a infinito. En una llama no premezclada se hace necesario definir las dos condiciones límite de la mezcla, cuando se tiene solo oxidante o solo combustible, sin embargo, “infinito” es un término relativo y ambiguo en los métodos numéricos ya que depende del orden de magnitud de cualquier otra cantidad con la que se le compare, de forma que para el desarrollo de un esquema numérico sería preferible contar con un parámetro acotado por 2 números reales cualesquiera sean estos. En ese orden de ideas y por razones que

se harán evidentes más adelante, se define φ como un nuevo parámetro adimensional para la mezcla.

$$\varphi = sY_{CH_4} - Y_{O_2} \quad (\text{Ec } 5.17)$$

Donde S es la relación oxígeno-combustible estequiométrica en términos de masa o moles (Ecuación 5.18).

$$\frac{64 [Kg_{O_2}]}{16 [Kg_{CH_4}]} = 4; \quad \frac{2 [N_{O_2}]}{1 [N_{CH_4}]} = 2 \quad (\text{Ec } 5.18)$$

Figura 29. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la relación de equivalencia.

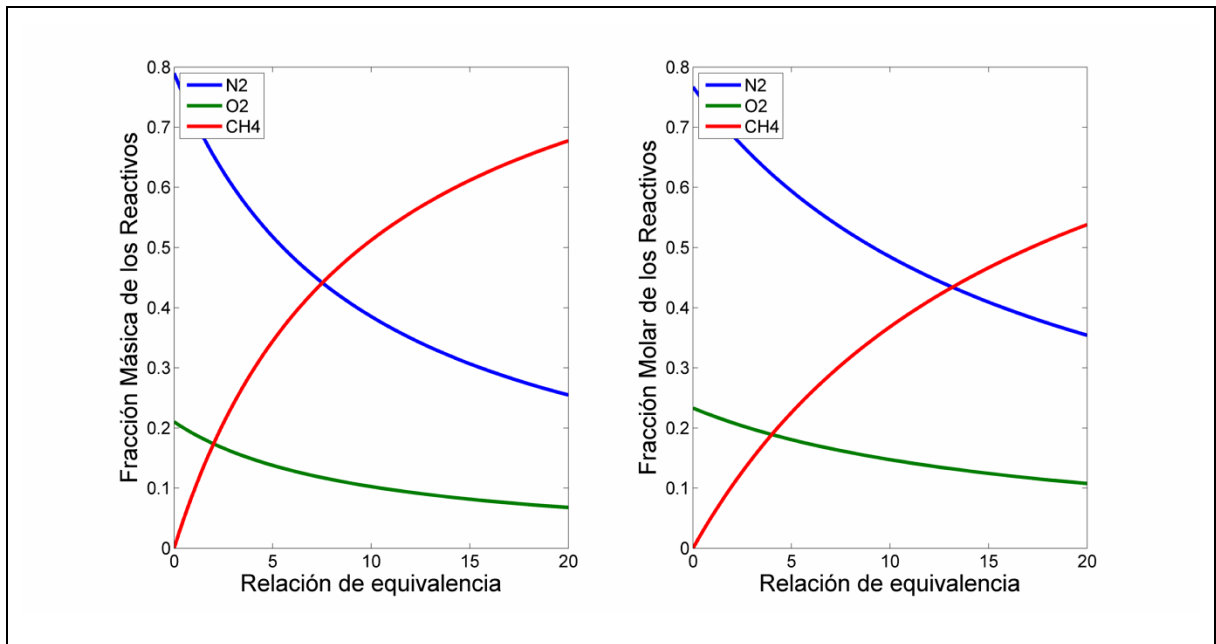
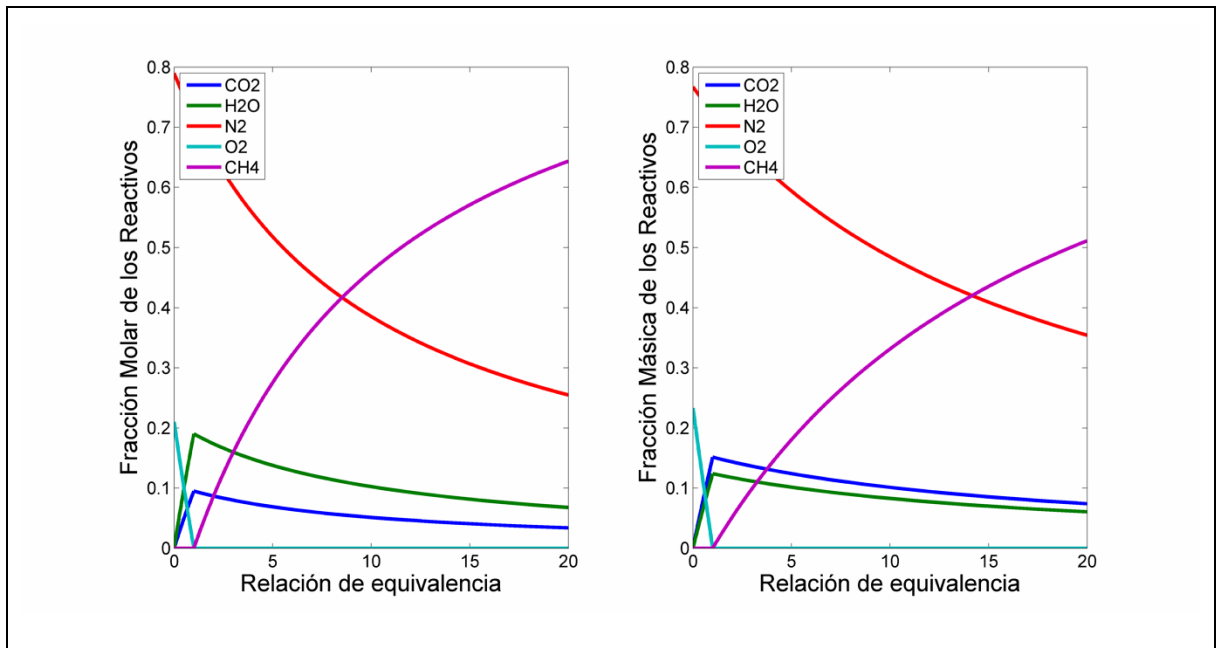


Figura 30. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la relación de equivalencia.



Observando la Figura 32 es evidente que φ resulta ser una mejor elección que Φ como parámetro adimensional para describir la mezcla. Esto no solo debido a que φ es un parámetro acotado mientras que Φ es abierto, sino también porque las fracciones de cada especie ahora son descritas por funciones lineales definidas por tramos en lugar de funciones de orden superior. Para el desarrollo de la Figura 31 y la Figura 32 a partir de la información mostrada en la Figura 29 y la Figura 30, lo único que se requiere es un cambio de base, para graficar la información en función de φ en lugar de Φ , sin embargo, desarrollar expresiones explícitas para las concentraciones molares y masicas en términos de φ resulta bastante extenso y por ende se omiten en este documento.

Figura 31. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la fracción de mezcla ϕ .

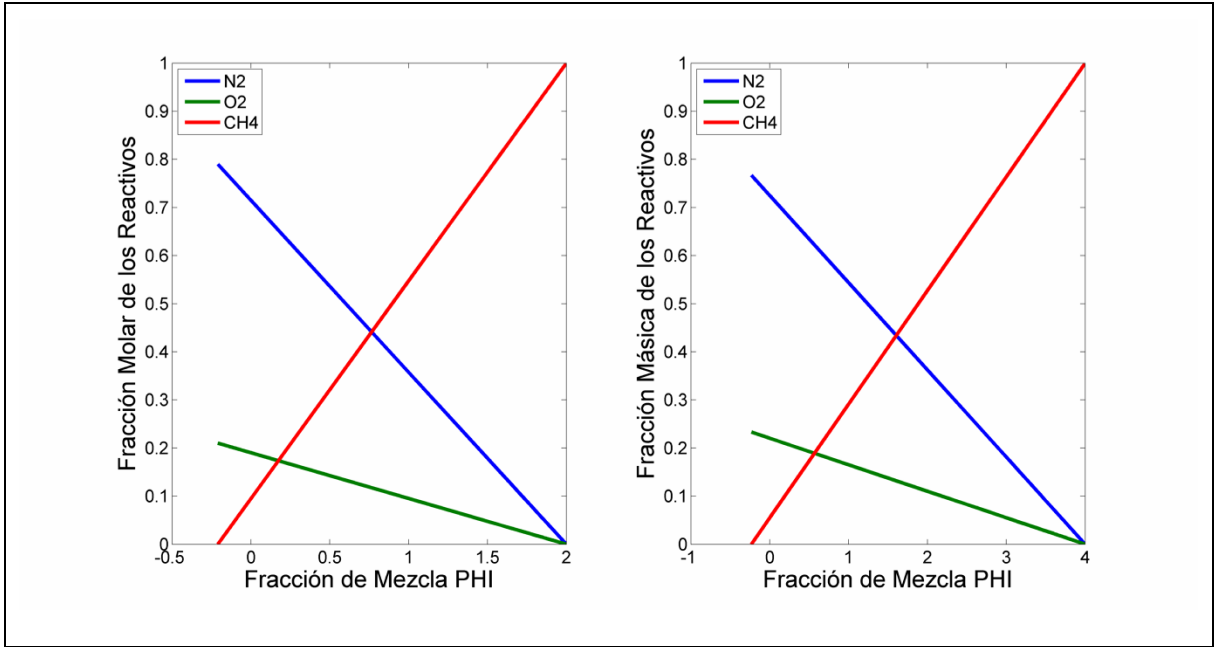


Figura 32. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la fracción de mezcla ϕ .

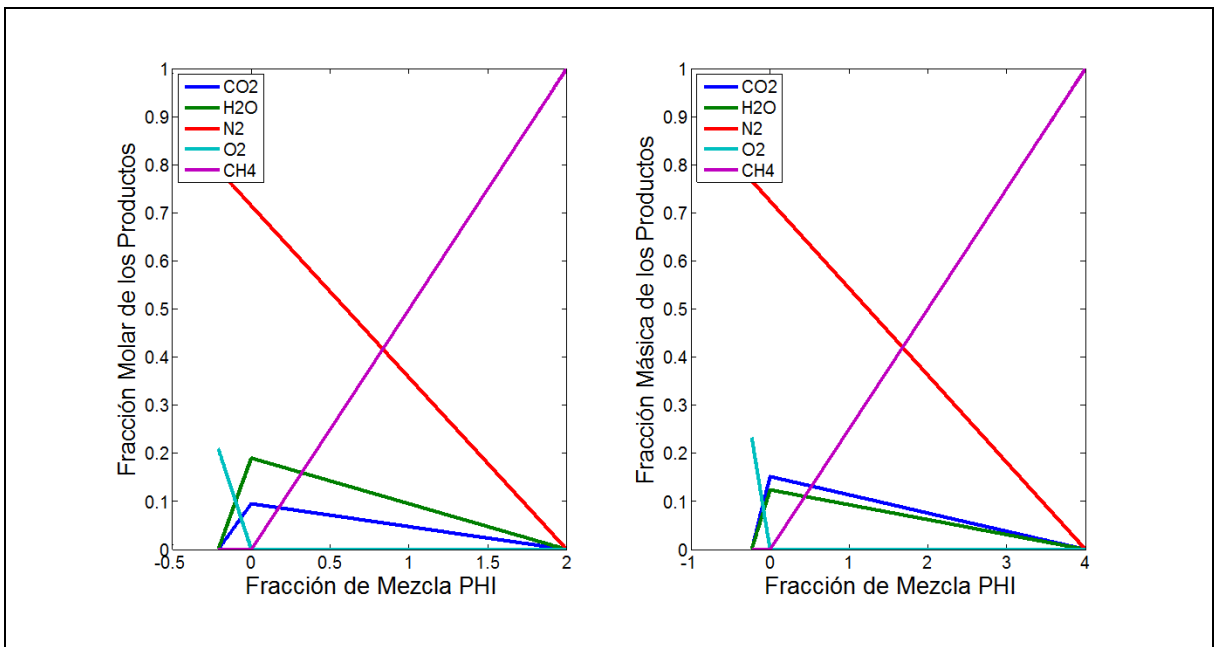


Figura 33. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los reactivos de combustión en función de la fracción de mezcla normalizada ξ .

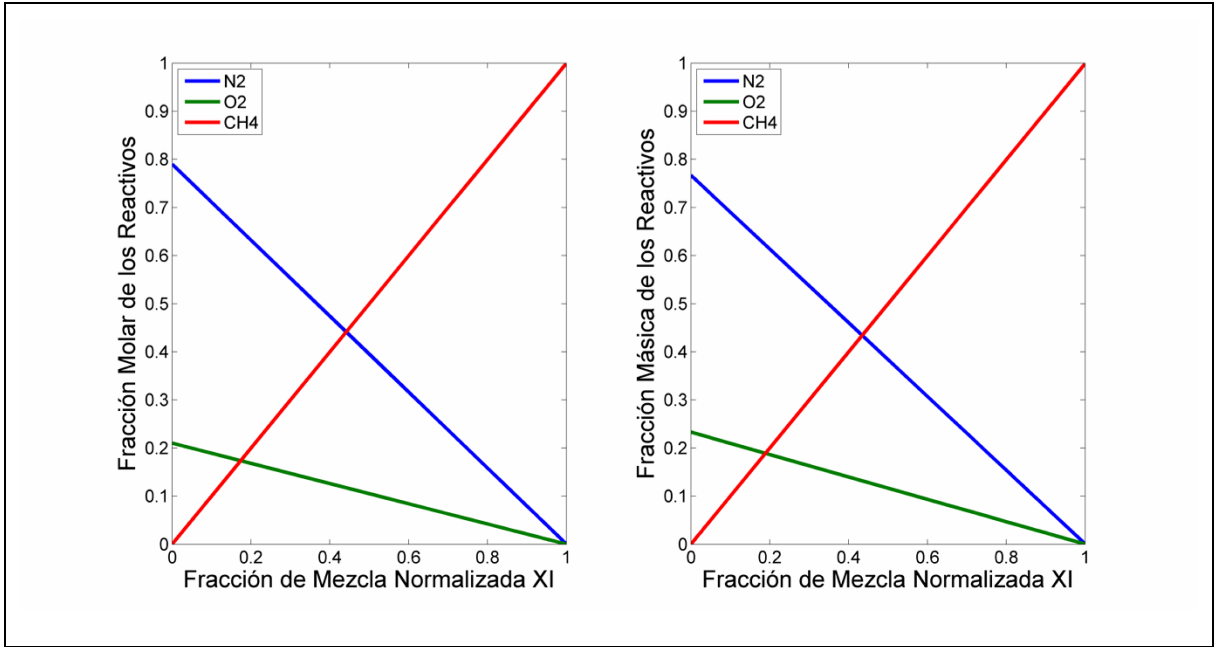
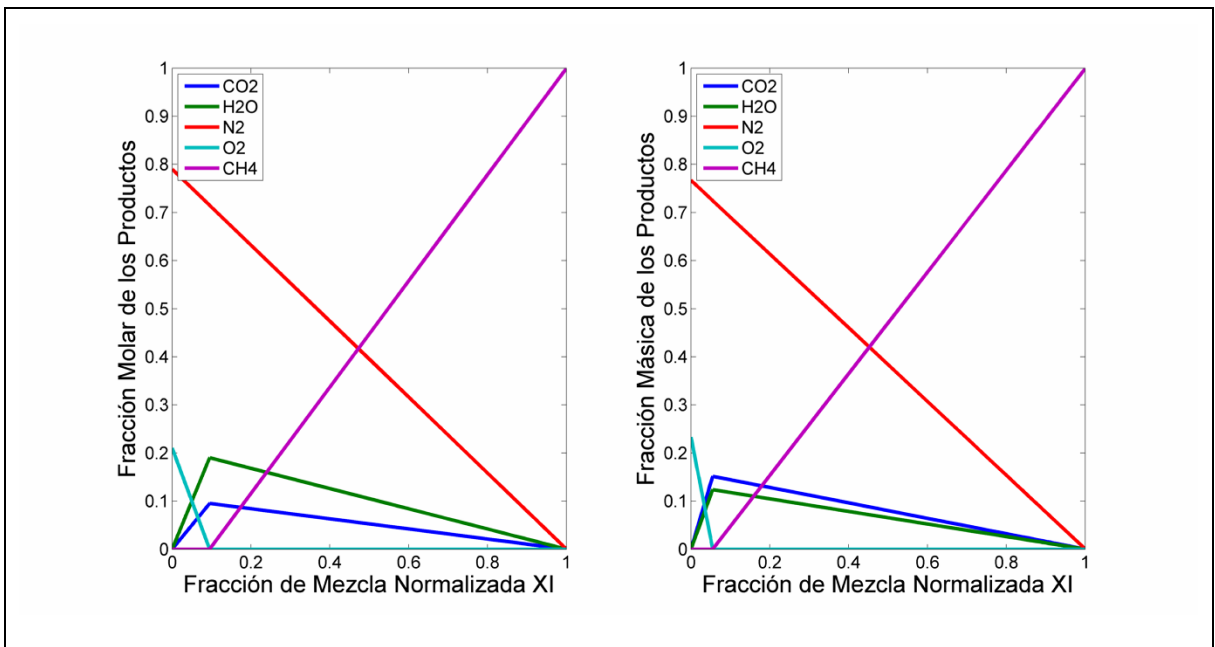


Figura 34. Fracciones molares (izquierda) y másicas (derecha) de los productos de combustión en función de la fracción de mezcla normalizada ξ .



Retomando el sistema de ecuaciones planteado en la Tabla 14, pero esta vez agrupando los productos de combustión con el nitrógeno en la especie denominada “inertes” se tienen 3 ecuaciones; una para el combustible, otra para el oxígeno y la mencionada para las especies inertes (Tabla 17). Nótese que la ecuación para los inertes no tiene término fuente. Por otra parte, la relación oxígeno-combustible estequiométrica en términos de masa (S), en el contexto del modelo “infinitely fast chemistry” implica que por cada kilogramo de metano consumido se deben proporcionar 4 de oxígeno y esto puede expresarse en términos de las velocidades de reacción como se muestra en la ecuación 5.19. El sistema puede simplificarse aún más asumiendo un único coeficiente de difusión de masa para todas las especies, el cual es igual a la difusividad térmica en cada punto del dominio ($Le = 1$).

$$4w_{CH_4} = w_{O_2} \quad (\text{Ec } 5.19)$$

Tabla 17. Sistema reducido de ecuaciones de conservación de especies.

Especie	Ecuación de conservación
CH_4	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{CH_4}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{CH_4}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{CH_4}) + w_{CH_4}$
O_2	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{O_2}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{O_2}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{O_2}) + 4w_{CH_4}$
In	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{In}) + \nabla \cdot (\bar{V} \rho Y_{In}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{In})$

Con base en el sistema de ecuaciones descrito en la Tabla 17 puede realizarse un artificio matemático al multiplicar la ecuación para el metano por la relación oxígeno-combustible estequiométrica (S) y sustraer de esta la ecuación para el

oxígeno. La ecuación para las especies inertes es redundante ya que conociendo la fracción de mezcla de 2 de las 3 especies presentes, la fracción de la especie desconocida puede determinarse a partir de las 2 conocidas por el principio de conservación de especies.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho(4Y_{CH_4} - Y_{O_2})) + \nabla \cdot (\bar{V}\rho(4Y_{CH_4} - Y_{O_2})) = \nabla \cdot (\rho D \nabla (4Y_{CH_4} - Y_{O_2})) \quad (\text{Ec } 5.20)$$

Donde el término $(4Y_{CH_4} - Y_{O_2})$ se sustituye por φ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\varphi) + \nabla \cdot (\bar{V}\rho\varphi) = \nabla \cdot (\rho D \nabla \varphi) \quad (\text{Ec } 5.21)$$

Al observar el parámetro adimensional φ se puede notar que este toma valores entre -1 y 4. Estos valores límites se obtienen cuando se evalúa φ a la entrada de la llama del lado del oxidante (cuando este es oxígeno puro) y del lado combustible cuando este es metano, respectivamente. Como sería más conveniente tener un parámetro cuyos valores varíen entre 0 y 1, se define el nuevo parámetro adimensional ξ como una normalización de φ .

$$\xi = \frac{\varphi - \varphi_0}{\varphi_1 - \varphi_0} \quad (\text{Ec } 5.22)$$

Donde los subíndices 0 y 1 indican el lado oxidante y el lado combustible respectivamente. Sustituyendo con la definición de φ se obtiene:

$$\xi = \frac{[sY_{CH_4} - Y_{O_2}] - [sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_0}{[sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_1 - [sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_0} \quad (\text{Ec } 5.23)$$

Nótese que la normalización de φ no afecta la ecuación diferencial ya que las derivadas espaciales de una constante (φ_1, φ_0) son nulas y la ecuación diferencial permanece inalterada en términos de ξ (Ecuación 5.24). Las condiciones de frontera sin embargo si se ven alteradas.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \nabla \cdot (\bar{V}\rho\xi) = \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) \quad (\text{Ec } 5.24)$$

Relaciones para las fracciones másicas de cada componente en la mezcla como funciones del parámetro adimensional de mezcla se presentan en la Tabla 18.

Tabla 18. Fracciones másicas en función de la fracción de mezcla adimensional ξ

	Zona diluida $0 \leq \xi < 1$	Zona estequiométrica $\xi = 1$	Zona rica $1 < \xi$
Oxígeno	$Y_{O_2} = \frac{\xi_{esteq} - \xi}{\xi_{esteq}} Y_{O_2_0}$	$Y_{O_2} = 0$	$Y_{O_2} = 0$
Metano	$Y_{CH_4} = 0$	$Y_{CH_4} = 0$	$Y_{CH_4} = \frac{\xi - \xi_{esteq}}{1 - \xi_{esteq}} Y_{CH_4_1}$
Productos	$Y_{pr} = 1 - (Y_{CH_4} + Y_{N_2} + Y_{O_2})$		
Nitrógeno	$Y_{N_2} = Y_{N_2_0}(1 - \xi) + Y_{N_2_1}\xi$		

Respecto a las condiciones de frontera, en todas las paredes y en el eje de simetría para el caso de las coordenadas axisimétricas, los flujos de ξ y por ende los flujos de todas las especies son nulos, esto se logra igualando a cero la derivada en la coordenada normal a la pared. A la entrada ξ es igual a 1 en el lado del combustible e igual a 0 en el lado del oxidante. Para la condición de frontera a la salida también se utiliza una condición de tipo II o abierta, igualando la derivada de ξ a cero en la dirección paralela la flujo.

Para el caso de una llama de metano-aire, asumiendo la composición estándar del aire (21% oxígeno y 79% nitrógeno), las fracciones másicas, las fracciones

molares al igual que el valor de los parámetros de mezcla φ y ξ a la entrada se muestran en la Tabla 19. Con base en los valores de φ en el lado combustible y en el lado oxidante es posible establecer el valor de ξ_{esq} según la ecuación 5.23.

Tabla 19. Composición de los reactivos a la entrada de la llama

		Oxígeno	Nitrógeno	Metano
Lado combustible	Fracción molar	$X_{O_2} = 0$	$X_{N_2} = 0$	$X_{CH_4} = 1$
	Fracción másica	$Y_{O_2} = 0$	$Y_{N_2} = 0$	$Y_{CH_4} = 0$
	φ	$\varphi = 4$ (masa)		
	ξ	$\xi = 1$		
Lado oxidante	Fracción molar	$X_{O_2} = 0.233$	$X_{N_2} = 0.767$	$X_{CH_4} = 0$
	Fracción másica	$Y_{O_2} = 0$	$Y_{N_2} = 0$	$Y_{CH_4} = 1$
	φ	$\varphi = -0.233$ (masa)		
	ξ	$\xi = 0$		

$$\xi_{esq} = \frac{[sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_1 - [sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_0}{[sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_1 - [sY_{CH_4} - Y_{O_2}]_0} = \frac{-\varphi_0}{\varphi_1 - \varphi_0} = \frac{0.233}{4 + 0.233} = 0.055 \quad (\text{Ec } 5.25)$$

Habiendo reducido el sistema de ecuaciones diferenciales parciales a una sola ecuación diferencial parcial homogénea no-lineal, expresada en la forma convencional de la ecuación de transporte tal como se presentaron en el capítulo 3, y mediante la especificación de las condiciones de frontera apropiadas, el modelo se encuentra completamente especificado y solo resta implementarlo como se presenta en el siguiente capítulo.

6. ENSAMBLE DEL MODELO

El objetivo de este proyecto es acoplar el modelo “mixed-is-burnt” con un modelo CFD para un flujo de densidad variable y de esta forma darle dimensiones físicas (x,y o r,z), con el fin de predecir y graficar perfiles de concentración de especies mayores y temperatura para una llama no premezclada de metano aire. En este capítulo se describirá brevemente las características del código desarrollado las cuales se resumen en la Tabla 20, junto con un esquema del algoritmo de solución el cual se presenta en la Figura 35.

En cumplimiento de los objetivos planteados en este proyecto, el algoritmo aquí presentado fue desarrollado teniendo en mente 3 aspectos fundamentales, estos son en orden de importancia: (1) Desarrollar un esquema aproximadamente conservativo (Lo más preciso posible), (2) con bajos requerimientos computacionales (Lo más rápido posible) y (3) de fácil implementación (Fácil de programar).

6.1. DISCRETIZACIÓN EN VOLÚMENES FINITOS

Para la discretización de las ecuaciones de flujo se escogió el método de los volúmenes finitos, el cual como se explicó en el capítulo 3 se basa en integrar la ecuación diferencial sobre el volumen de control. Los volúmenes finitos son la técnica de discretización por excelencia para problemas de flujo de fluidos, ya que a diferencia de los esquemas en diferencias y elementos finitos, estos constituyen una formulación robusta y conservativa sin importar el tipo y la densidad de malla utilizadas. Puede decirse que la discretización en volúmenes finitos tiene el sentido “físico” del que carecen las diferencias y los elementos finitos.

6.2. ACOPLAMIENTO DE PRESIONES

Para el acoplamiento de presiones se utilizó el método SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations). Este algoritmo fue desarrollado por Spalding y Patankar en 1972 y grosso modo consiste en expresar el principio de conservación de masa en términos de la presión hidrodinámica. Para tal fin, el algoritmo plantea avanzar las velocidades utilizando las ecuaciones de los momentos, para luego imponer el principio de conservación de masa en el campo de flujo mediante la aplicación de un campo de presiones. Este algoritmo es el más simple y robusto de todos los mencionados en la Tabla 20.

6.3. TRATAMIENTO DEL TÉRMINO CONVECTIVO

Cualquiera sea el método de discretización escogido (volúmenes, diferencias o elementos finitos), o el método de acoplamiento de la presión (SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC, PISO) el término convectivo presenta una dificultad especial en la ecuación a discretizar ya que es el que introduce la no-linealidad así como los problemas de acoplamiento entre las formas discretas de las ecuaciones de conservación de momentum y la ecuación de conservación de masa en términos de la presión; más conocida como la ecuación de Poisson.

La formulación híbrida descrita en el capítulo 3 y como su nombre lo indica, es una mezcla entre la formulación basada en diferencias centrales y la formulación Upwind. Para números de Peclet bajos donde los efectos difusivos son importante se utiliza la formulación basada en diferencias centrales, aprovechando que esta no presenta problemas de estabilidad en esta región, mientras que para los números de Peclet altos se utiliza la formulación Upwind. De esta forma se aprovechan las ventajas de cada algoritmo y se evitan los problemas de inestabilidad o excesiva “falsa difusividad”. Una notable desventaja del esquema híbrido comparado con la diferencias centrales es que este resulta ser un orden de magnitud menos “preciso”. En otras palabras, según la expansión en series de

Taylor, el orden de magnitud del error en la ecuación discretizada es ΔX comparado con ΔX^2 utilizando diferencias centrales. Donde ΔX es el espaciamiento nodal.

6.4. MALLA UTILIZADA

Respecto a la malla utilizada, por simplicidad se ha escogido una malla ortogonal escalonada con espaciamiento constante entre nodos. En este proyecto solo se contemplan mallas en 2D, (X y Y) en el caso de las coordenadas cartesianas y (r, Z) en el caso de las coordenadas axisimétricas. El proceso de mallado se incluyó como parte del pre-procesamiento, es decir que la malla no es modificada durante el proceso de iteración.

6.5. PROPIEDADES TERMO-FÍSICAS

La solución numérica de un flujo reactivo requiere de ciertos parámetros de entrada como la viscosidad, la masa molecular, el calor específico, la entalpia de formación entre otros. Tales parámetros fueron tomados de la base de datos de la NASA tal como es presentada en *An Introduction to Combustion Concepts and Applications*, [22] por S.Turns. Para el cálculo de las propiedades de mezcla se utilizó en todos los casos una ponderación las propiedades para cada componente en la mezcla.

6.6. MECANISMO DE REACCIÓN

Para el desarrollo de este proyecto no se empleará ningún mecanismo de reacción, ya que se tendría que lidiar con el sistema completo de ecuaciones de conservación de especies y hacerlo implicaría un costo computacional considerable además de un incremento en la complejidad del problema, ambos en

detrimento de los objetivos del proyecto. En su lugar, se empleará el modelo “Infinitely fast chemistry” descrito en la sección anterior.

6.7. COEFICIENTES DE DIFUSIÓN

En este proyecto no se hace necesario calcular los coeficientes de difusión ya que estos son estimados asumiendo que el parámetro adimensional de Lewis es igual a 1. Esta aproximación presenta como única ventaja la reducción del trabajo computacional, cabe mencionar, a expensas de perder rigurosidad en la imposición del principio de conservación de masa.

$$Le = \frac{\alpha}{D} = 1, \Rightarrow \alpha = D \quad (\text{Ec } 6.1)$$

6.8. LENGUAJE DE PROGRAMACIÓN

La escogencia de un lenguaje de programación y un compilador para la solución de problemas iterativos es usualmente una decisión basada netamente en criterios de “performance”. Sin embargo, otros factores como la existencia de un código previo en un lenguaje específico que sirve de base para el nuevo código o la familiaridad del programador con un lenguaje en especial pueden influir en dicha decisión.

Lenguajes de bajo nivel como C, C++ y Fortran son usualmente las opciones más atractivas para resolver problemas en CFD, esto debido a que cada una de las rutinas puede optimizarse al nivel más fundamental controlando el uso de la memoria, aclarando que esta es una tarea ardua que requiere conocimientos profundos del compilador empleado. Por otro lado, lenguajes de programación de más alto nivel o herramientas como Matlab, si bien no permiten un control absoluto de la memoria, facilitan la programación al poner a disposición del usuario múltiples funciones pre-programadas y optimizadas de fábrica. Por su facilidad de

uso y el conocimiento previo que el autor tiene de esta herramienta, en este proyecto el lenguaje escogido para la codificación es Matlab,

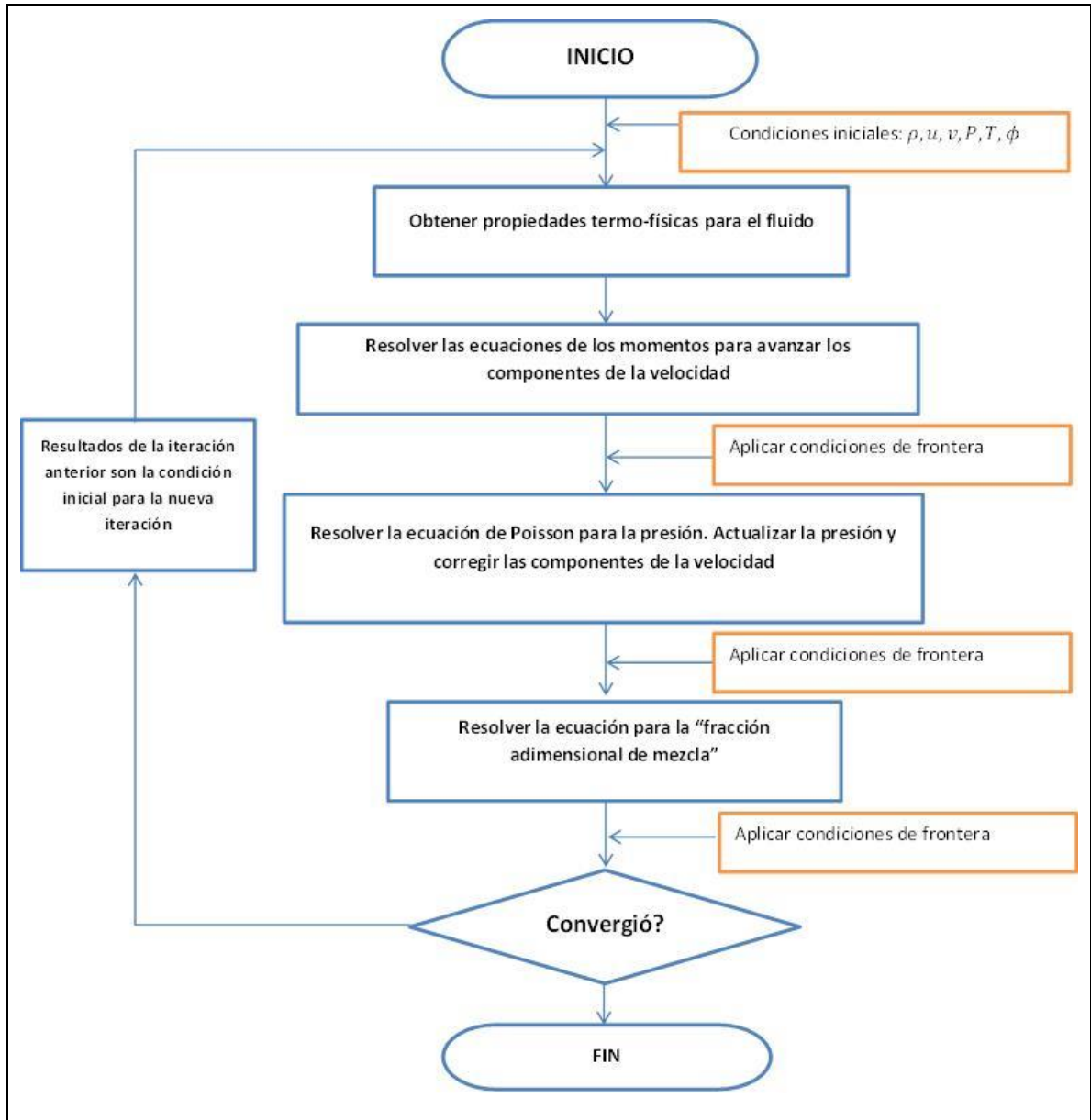
Algoritmo de solución

La solución numérica para el modelo de una llama laminar como el planteado en esta sección no difiere mucho del algoritmo de solución empleado para la solución de la capa límite térmica sobre una placa plana en el capítulo 4. Una llama no es más que un flujo compresible o de densidad variable, donde las variaciones en la densidad resultan de las variaciones en la composición de la mezcla y no por la acción de la presión como sucede en flujo supersónico. En ese orden de ideas, el algoritmo de solución para el modelo “mixed-is-burnt” es el mismo algoritmo de solución para un campo de flujo laminar, más una ecuación adicional para la variable adimensional de mezcla, como se muestra en la Figura 35.

Tabla 20. Descripción del algoritmo de solución.

Descripción del algoritmo	Opción utilizada	Otras opciones
Discretización	Volúmenes finitos	Diferencias finitas, elementos finitos
Discretización del término convectivo	Híbrido	Central differences, Upwind, Power-Law, QUICK
Malla	Ortogonal escalonada	No ortogonales, colocadas, localmente refinadas. Etc.
Acoplamiento de presiones	SIMPLE	SIMPLER, SIMPLEC, PISO
Mecanismo de reacción	Infinitely fast chemistry, "mixed-is-burnt model"	GRI, Chemkin
Coefficientes de difusión	$Le = 1$	Teoría cinética de gases
Propiedades termo-físicas	NASA thermodynamic database	NIST
Lenguaje de programación	MatLab	C,C++,Fortran, Java

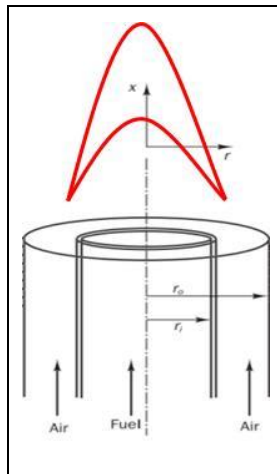
Figura 35. Diagrama de flujo del algoritmo de solución.



7. RESULTADOS DEL MODELO

En los capítulos anteriores se planteó el método de los volúmenes finitos para la solución numérica de las ecuaciones que gobiernan un flujo laminar compresible, así como el modelo de una sola ecuación conocido como “mixed-is-burnt” que permite simplificar el sistema de ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan el comportamiento de una llama no premezclada. En esta sección se presentarán los resultados cualitativos del modelo descrito anteriormente con el fin de explicar el comportamiento de una llama laminar difusa de metano-aire en flujo paralelo. Los resultados cuantitativos incluyendo la validación del modelo se presentarán en la siguiente sección.

Figura 36. Esquema de una llama laminar difusiva en flujo paralelo.



Una llama laminar difusa o no-premezclada como la que se muestra en la Figura 36 es aquella en la que el combustible y el oxidante entran en contacto por primera vez en el quemador, a diferencia de las llamas premezcladas en donde los

reactivos son introducidos a una cámara de mezclado antes de que se dé la reacción de óxido-reducción.

En una llama existen principalmente 2 fenómenos que caracterizan el comportamiento de la misma, estos son la difusión de masa y la cinética química. La primera es dominante en las llamas no-premezcladas ya que la velocidad con la que los reactivos reaccionan depende en primer lugar de la disponibilidad de los mismo, mientras que la segunda es el fenómeno dominante en las llamas premezcladas ya que en estas se garantiza la disponibilidad de los reactivos y por ende la velocidad de reacción depende enteramente de la cinética propia de la reacción. Es precisamente el hecho de que en una llama no-premezclada la velocidad de combustión es controlada principalmente por el efecto de la difusión de masa más que por el efecto de la cinética de la reacción, que una simplificación del mecanismo de reacción a una sola ecuación de transporte resulta válida (el modelo planteado en este proyecto).

El modelo desarrollado fue corrido para unas condiciones escogidas a priori con la intención de mostrar claramente el comportamiento de la llama y obtener las gráficas de la Figura 37 y la Figura 38. Por ahora las dimensiones, los flujos de aire y combustible, la densidad de malla y los parámetros de relajación no son relevantes. Como se mencionó anteriormente los resultados cuantitativos y la validación del modelo se presentan en la siguiente sección

En la Figura 37 (izquierda) se presentan las curvas de nivel para la variable adimensional de mezcla ξ , donde la línea negra representa el contorno de la llama. En el caso de una simulación, se denomina llama a toda porción del dominio donde la fracción másica de combustible o radicales sea mayor que 0.2% o cualquier otro valor establecido a juicio del programador. Sin embargo, como en la simulación presentada en este trabajo solo se contemplan las especies mayores bajo la simplificación “mixed-is-burnt”, la definición se modificó sutilmente para definir el contorno de llama como aquellos puntos del dominio en los cuales existe una mezcla estequiométrica entre el oxidante y el combustible $\xi = \xi_{esq}$.

La definición de llama basada solamente en la iso-línea de ξ que delimita la presencia de combustible en el dominio implica en otras palabras que en un punto dado del dominio la presencia de combustible es condición necesaria y suficiente para la existencia de una llama visible. Si bien esta apreciación puede parecer evidente no es del todo certera, ya que la presencia de combustible en una llama real no necesariamente garantiza que esta emita radiación dentro del espectro visible y sea detectable por el ojo humano.

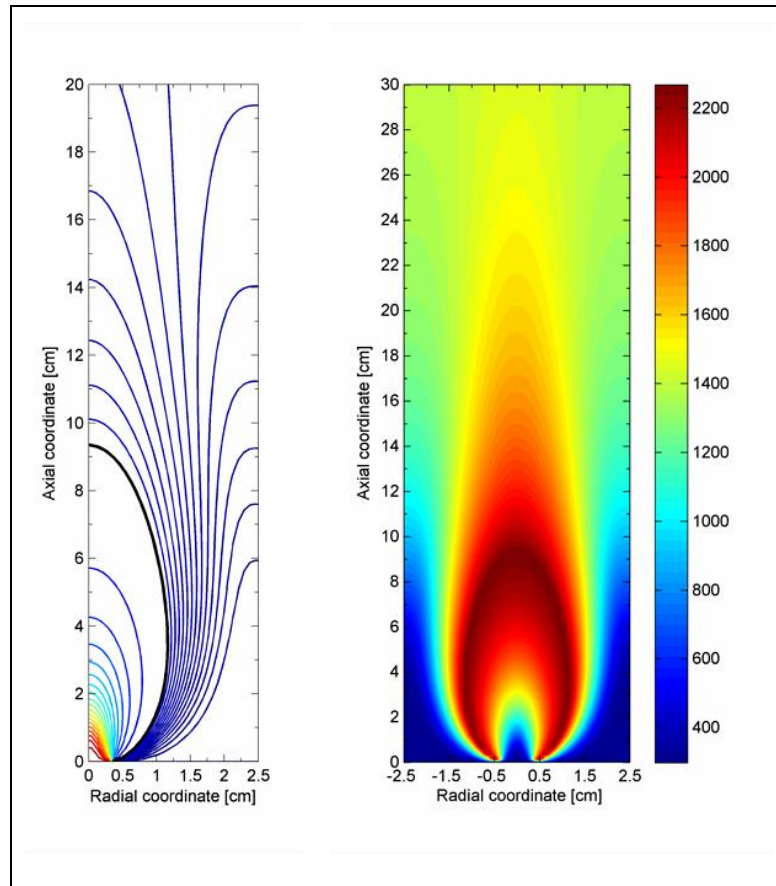
La presencia de combustible fuera de la llama visible en un proceso real es un problema grave ya que los hidrocarburos no quemados son altamente contaminantes. Cabe recalcar que la emisión de hidrocarburos no quemados (UH) y compuestos orgánicos volátiles (VOC) no necesariamente resulta de una deficiencia de oxígeno global en la llama, por el contrario, aún en llamas hiperventiladas estos compuestos pueden coexistir con el oxígeno en los gases de escape sin reaccionar. Lamentablemente las simplificaciones hechas en el modelo tratado en este proyecto no permiten modelar este aspecto ya que tanto los UH como los VOC son especies menores y por ende son ignorados.

En la Figura 37 (derecha) se presenta el perfil de temperaturas de la llama, con la respectiva barra de colores al costado derecho. A pesar de que las 2 gráficas en la Figura 37 no están en la misma escala, es posible observar como las zonas de mayor temperatura coinciden con el contorno de la llama. Esto se debe a que es el contorno de la llama donde el combustible y el oxidante se encuentran mezclados estequiométricamente, lo que significa que la reacción de combustión agota completamente ambos reactivos y los transforma en productos, liberando toda la energía disponible en el combustible.

En cualquier otro lugar del dominio al interior del contorno de la llama, la reacción de combustión se da de forma incompleta debido a la falta de oxígeno. Se puede apreciar que en esta zona las temperaturas son menores que en el contorno de la llama, no solo porque el combustible se oxida más lentamente debido a la falta de oxígeno sino también debido a que la energía liberada por las reacciones

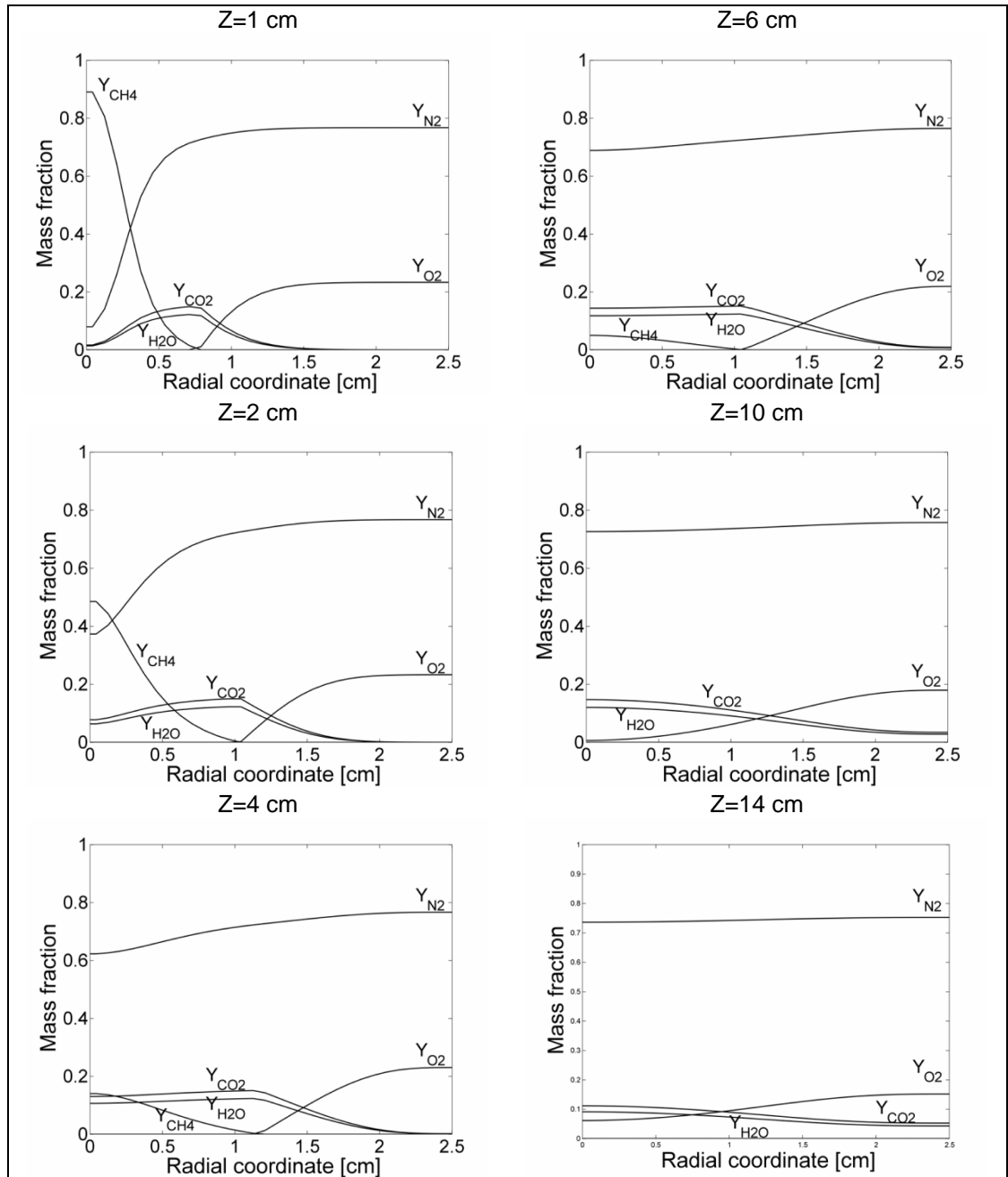
(incompletas) que allí ocurren se ve reflejada en el incremento de temperatura del combustible que aún no ha reaccionado.

Figura 37. Curvas de nivel para la variable adimensional de mezcla (izquierda) y la temperatura de llama (derecha).



En la Figura 38 se presentan los perfiles radiales de concentración de cada una de las especies involucradas para diferentes alturas medidas desde la base de la llama. En las gráficas para $Z=1,2,4$ y 6 puede apreciarse como la concentración de metano disminuye paulatinamente mientras que las concentraciones de productos se incrementan en la zona central de la llama. También puede apreciarse como para $Z=10$ y $Z=14$ el metano ha sido completamente consumido y los perfiles tienden a hacerse cada vez más planos en la medida en que los gases se distribuyen uniformemente en la zona superior de la llama.

Figura 38. Perfiles radiales de concentración de cada una de las especies involucradas para diferentes alturas de la llama.



La distribución casi homogénea de los perfiles de concentración de cada especie en la dirección radial en la parte alta de la llama demuestra la validez de la condición de frontera abierta para todas las cantidades a la salida del dominio a excepción de la presión.

En este documento se ha mencionado en varias ocasiones el carácter conservativo de la discretización en volúmenes finitos sin importar el tipo o la densidad de la malla utilizada. Sin embargo, también se mencionó que la utilización de un único coeficiente de difusión de masa, el cual es igual a la difusividad térmica para la mezcla asumiendo un número de Lewis igual 1, tiene la desventaja de flexibilizar el requerimiento de “conservación” de las especies implicadas.

El método de los volúmenes finitos garantiza la conservación global de masa, mientras que la simplificación a un número de Lewis unitario por sí sola no es la causante de la no conservación de las especies. La razón por la cual las especies no son estrictamente conservadas, es porque al reducir el sistema de ecuaciones de conservación para las especies a una única ecuación de transporte para un parámetro adimensional, se tiene que asumir un único coeficiente de difusión para dicho parámetro de mezcla, que resulta equivalente a establecer un único coeficiente de difusión de masa para las 5 especies involucradas. Asumir un único coeficiente de difusión de masa garantiza la conservación de las especies solo en el caso de una mezcla binaria (2 componentes), para una mezcla de múltiples componentes se debería establecer un coeficiente de difusión para cada gas respecto a la mezcla.

En este trabajo la conservación global de masa se garantiza monitoreando los errores en la ecuación de la presión, mientras que la conservación de cada una de las especies se monitorea integrando los valores de las mismas a la entrada y a la salida. Los errores en la conservación global de masa se mantienen como mínimo en el orden de $10e-14$ mientras que los errores globales relativos para cada una de las especies son siempre inferiores al 0.1%.

8. VALIDACIÓN DEL MODELO

Validar un modelo significa comparar los resultados proporcionados por este para unas condiciones de entrada que han sido previamente estudiadas y sus resultados están disponibles en la literatura. La validación puede realizarse ya sea comparando con datos experimentales de estudios ampliamente referenciados en la literatura, o con otras simulaciones basadas en modelos diferentes al que se desea evaluar.

El objetivo de la simulación es predecir resultados bajo diferentes parámetros de entrada, sin embargo, validar cada set de resultados implicaría en un proceso tan tedioso que opacaría todas las ventajas de una simulación en comparación de otras técnicas de investigación. En este orden de ideas, la metodología para validar un modelo no es comprar todos y cada uno de los resultados que se obtienen de este, si no por el contrario, darle credibilidad al modelo mediante la verificación de solo algunos resultados, esperando que este se comporte de manera adecuada para cualquier otro set de parámetros de entrada dentro de las limitaciones preestablecidas del modelo.

En el caso de una llama, la selección de cual variable o propiedad se debe escoger para realizar la validación del modelo no es una decisión evidente. Esto debido principalmente a que se involucran muchas variables (u, v, p, Y_i, T, h) y todas de alguna manera proporcionan información única que permite caracterizar cada uno de los fenómenos que ocurren al interior de la llama. Como se ha mencionado a largo de todo el documento, existe un fuerte acoplamiento entre los diferentes fenómenos físico-químicos actuando en un flujo reactivo, esto quiere decir que una perturbación en uno de los fenómenos se ve claramente reflejada en todos los demás, lo que resulta favorable al momento de validar el modelo ya que no es necesario comparar todas y cada una de las variables o propiedades de la

llama, si no por el contrario, basta con validar solo algunas de ellas, las que resulten más críticamente ligadas a las demás.

El proceso de validación también está ligado al objetivo de la simulación. Es decir, si el usuario está interesado en el perfil de velocidades entonces la velocidad es evidentemente la variable a validar; si por el contrario el usuario está interesado en predecir temperaturas o concentración de especies son estas la primera opción para realizar la validación mientras que todas las demás variables pueden de alguna forma ignorarse durante este proceso. La selección de la variable a validar es también una función de los datos experimentales o resultados de simulaciones anteriores de los que se disponga. Por ejemplo, validar un perfil de velocidades con datos provenientes de soluciones analíticas o simulaciones previas no presenta gran dificultad, sin embargo, esto no es posible con datos experimentales dada la dificultad para obtener información cuantitativa sobre la velocidad de forma no intrusiva. Lo opuesto ocurre con la temperatura, si bien la utilización de una termocupla para adquirir temperaturas es un método intrusivo, este no presenta mayores complicaciones y permite adquirir información cuantitativa de gran utilidad para la validación.

Además de las variables termo-físicas, otros aspectos más evidentes como la forma de la llama caracterizada por su altura, ancho o relación de aspecto, al igual que el color pueden utilizarse para comparar diferentes configuraciones de llama. En este proyecto la validación del modelo que fue presentado en las secciones anteriores se realizará comparando la altura de la llama obtenida en la simulación, con la altura predicha por la ecuación 8.1 desarrollada por F.G. Roper [20], de forma teórica y calibrada con parámetros experimentales para quemadores con puertos circulares, determinados por el mismo autor y presentados en [21].

$$L = \frac{Q_f(T_\alpha/T_{fuel})}{4\pi D_\alpha \ln\left(1 + \frac{1}{S}\right)} \left(\frac{T_\alpha}{T_{flame}}\right)^{0.67} \quad (\text{Ec } 8.1)$$

$$L = 1330 \frac{Q_f (T_\alpha / T_{fuel})}{\ln \left(1 + \frac{1}{s} \right)} \quad (\text{Ec } 8.2)$$

Dónde:

Q_f = flujo volumétrico de metano

T_α = temperatura de entrada del oxidante

T_{fuel} = temperatura de entrada del combustible

s = relación *aire/combustible* estequiométrica en moles

Para la validación del modelo se compararon los resultados para 4 tamaños del puerto de combustible y 8 velocidades de entrada, esta última es igual para el aire y el combustible. Todas las 32 combinaciones fueron corridas sin embargo no todas son presentadas a continuación debido a que algunas de ellas resultan en llamas ya sea; muy altas o muy pequeñas, que exceden los límites de las correlaciones utilizadas para la validación. Un total de 16 llamas numeradas en la Tabla 21 y cuyas condiciones se muestran en la Tabla 22 serán presentadas a continuación. Los archivos de extensión .mat que contienen todas las variables y los resultados de cada simulación se entregaran como anexos no impresos.

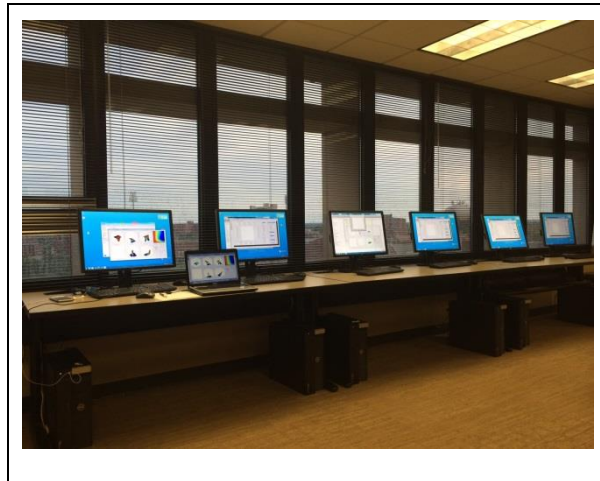
Tabla 21. Diseño experimental para la validación.

Diámetro del quemador		Velocidad de entrada [m/s]							
[# nodos]	[m]	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08
14	1.96	1	2	-	-	-	-	-	-
10	1.4	-	3	4	5	-	-	-	-
7	0.98	-	6	7	8	9	10	11	-
4	0.56	-	-	-	12	13	14	15	16

Dado que no es posible realizar un estudio de convergencia de malla para cada uno de los casos analizados y con el fin de estandarizar las condiciones para cada simulación; para todas las llamas se estableció un dominio físico en coordenadas axisimétricas de 7 cm de radio y 70 cm de alto, con 50 volúmenes de control en la dirección radial y 70 en la dirección axial. De esta forma se suprime la influencia del dominio en los resultados, valga la aclaración, solo cuando estos son analizados de forma comparativa. Considerando que tanto el modelo desarrollado en este trabajo como la correlación utilizada para la validación son válidos únicamente para llamas hiperventiladas, todas las condiciones escogidas conducen a relaciones de equivalencia menores a 1.

Si bien el modelo no resulta muy costoso en términos computacionales, su ejecución toma entre 1 y 2 horas para mallas de 50x70. Con el propósito de acelerar el proceso se utilizaron 6 computadores trabajando de forma independiente corriendo cada uno un modelo a la vez.

Figura 39. Equipos de cómputo empleados



En la Tabla 22 se presentan también las temperaturas promedio para cada llama comparadas con la temperatura de llama adiabática esperada para la misma

relación de equivalencia. Las temperaturas de llama adiabática fueron calculadas utilizando una rutina escrita en EES (Engineering equation Solver) la cual se presenta como anexo impreso. También se presenta la comparación entre las longitudes de llama determinadas en la simulación y las estimadas utilizando la correlación propuesta por Roper [20].

Analizando los errores encontrados tanto en la longitud de la llama como en la temperatura de llama adiabática, se encuentra que los valores difieren como mínimo 0.85% y como máximo 13.95% para la temperatura. De forma similar para la longitud, el error mínimo encontrado fue de tan solo 1.03% y el máximo de 9.55%. En promedio los errores para ambos parámetros se encuentran dentro del rango admisible menor al 5%, sin embargo, resulta interesante por no decir inconsistente con la teoría, el hecho de que el modelo proporcione diferentes temperaturas de llama para una misma relación de equivalencia.

Las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos y la transferencia de calor se basan fundamentalmente en modelos determinísticos y por lo tanto no se esperaría que un determinado problema admita más que una única solución verídica, en este caso una misma relación de equivalencia debería proporcionar una misma temperatura promedio para los flujo de escape a la salida. Sin embargo, la utilización de un esquema de solución numérica si bien resulta conveniente, implica la inclusión de errores adicionales a aquellos presentes en el modelo. Errores de aproximación “round off”, errores del esquema de discretización, errores debidos al orden de la aproximación por series de Taylor “truncation errors”, así como posibles errores en el código, entre muchos otros. La explicación más probable para la incongruencia entre las temperaturas de llama y la relación de equivalencia es la utilización de una malla no refinada, que conlleva fuertes efectos de falsa difusividad debida a la utilización del esquema upwind para el término convectivo.

Por otra parte, al observar la ecuación 8.2 se puede notar que la altura de la llama no depende explícitamente del diámetro del quemador sino del flujo volumétrico de

combustible. Este mismo comportamiento se puede observar al analizar en conjunto las llamas #1, #5 y #11, las cuales son formadas con flujos de combustible aproximadamente iguales de entre $2.11E-05$ y $2.46E-05$ [m³/s] y resultan en alturas de llama similares, 32.14, 32.80 y 28.12 [cm] respectivamente, a pesar de tener radios del puerto de combustible significativamente diferentes 1.96, 1.40 y 0.98 [cm]. Las llamas #2, #3 y #8 analizadas en conjunto corroboran lo dicho anteriormente.

Después de analizar los resultados en la Tabla 22, en términos generales puede decirse que el modelo “mixed-is-burnt” replica con significativa precisión tanto los efectos físicos de un flujo compresible como los efectos químicos intrínsecos a la combustión del metano. En ese orden de ideas y para concluir este capítulo, cabe recalcar que las limitaciones del modelo al igual que los eventuales errores son compensados por la relativa simplicidad del modelo, en términos de su fácil implementación comparada con un modelo completo, y del reducido esfuerzo computacional requerido para su solución numérica.

Tabla 22. Descripción de los parámetros de las llamas utilizadas para la validación.

# llama	Relación de equivalencia	Velocidad de flujo	Flujo de metano [m ³ /s]	Flujo de aire [m ³ /s]	Temperatura de llama simulación [K]	Temperatura de llama EES [K]	% Error temperatura	Longitud teórica [cm]	Longitud simulación [cm]	% error longitud	Radio quemador [# nodos]	Radio quemador [cm]
1	0.81	0.02	2.41E-05	2.84E-04	1940.78	2006	3.30	32.14	31.17	3.02	14.00	1.96
2	0.81	0.01	1.21E-05	1.42E-04	1902.01	2006	5.18	16.07	15.08	6.18	14.00	1.96
3	0.40	0.02	1.23E-05	2.96E-04	1167.09	1275	8.39	16.40	15.79	3.69	10.00	1.40
4	0.40	0.03	1.85E-05	4.43E-04	1203.40	1275	5.64	24.60	24.33	1.08	10.00	1.40
5	0.40	0.04	2.46E-05	5.91E-04	1257.23	1275	1.41	32.80	35.93	9.55	10.00	1.40
6	0.19	0.02	6.03E-06	3.02E-04	717.52	810	11.35	8.04	8.22	2.29	7.00	0.98
7	0.19	0.03	9.05E-06	4.53E-04	755.15	810	6.79	12.05	12.32	2.21	7.00	0.98
8	0.19	0.04	1.21E-05	6.04E-04	794.90	810	1.97	16.07	16.63	3.49	7.00	0.98
9	0.19	0.05	1.51E-05	7.55E-04	836.87	810	3.20	20.09	21.05	4.79	7.00	0.98
10	0.19	0.06	1.81E-05	9.06E-04	880.03	810	8.64	24.11	25.52	5.87	7.00	0.98
11	0.19	0.07	2.11E-05	1.06E-03	923.44	810	13.95	28.12	30.07	6.92	7.00	0.98
12	0.06	0.04	3.94E-06	6.12E-04	455.43	469	2.98	5.25	5.19	1.03	4.00	0.56
13	0.06	0.05	4.93E-06	7.65E-04	473.68	469	0.85	6.56	6.36	2.99	4.00	0.56
14	0.06	0.06	5.91E-06	9.18E-04	491.74	469	4.69	7.87	7.58	3.70	4.00	0.56
15	0.06	0.07	6.90E-06	1.07E-03	509.45	469	8.52	9.18	8.87	3.37	4.00	0.56
16	0.06	0.08	7.88E-06	1.22E-03	526.62	469	12.15	10.49	10.16	3.17	4.00	0.56

Figura 40. Curvas de nivel de la fracción de mezcla adimensional para las llamas de validación 1 a la 8.

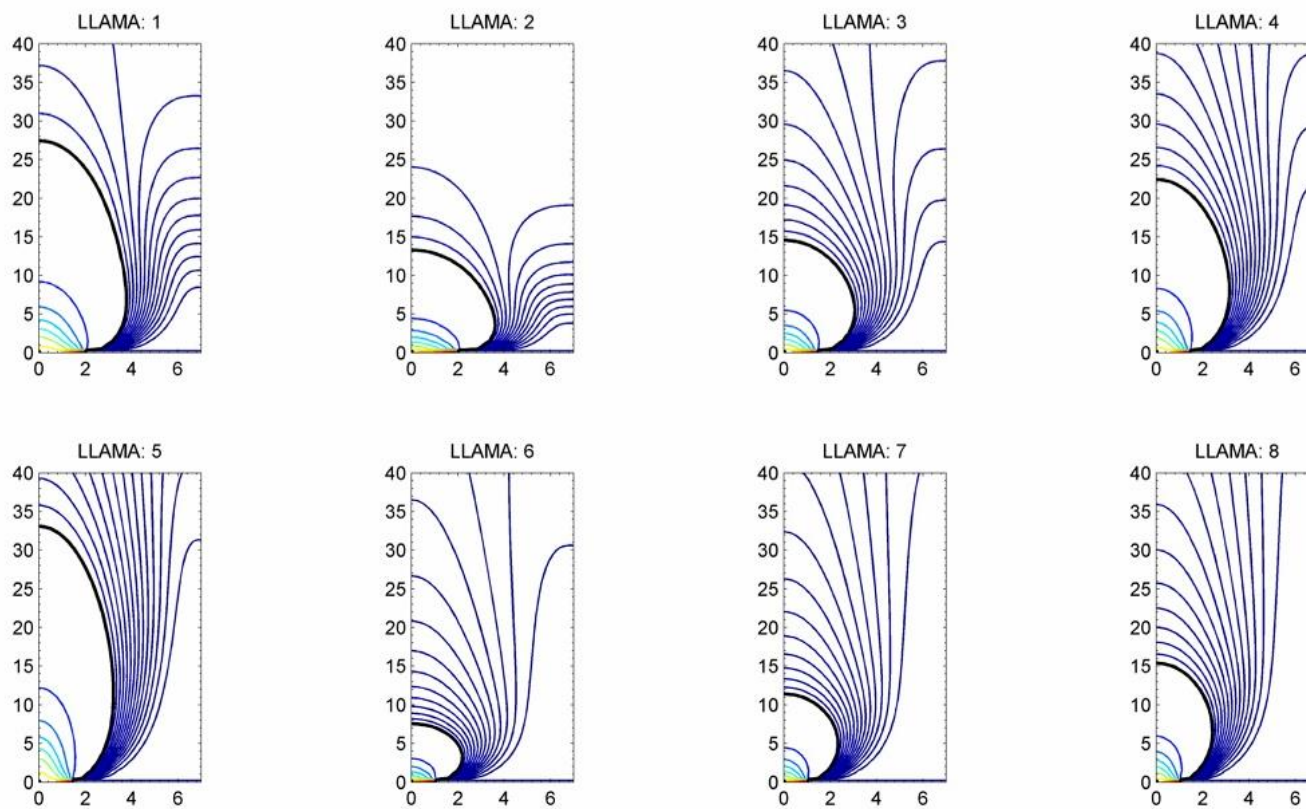


Figura 41. Curvas de nivel de la fracción de mezcla adimensional para las llamas de validación 8 a la 16.

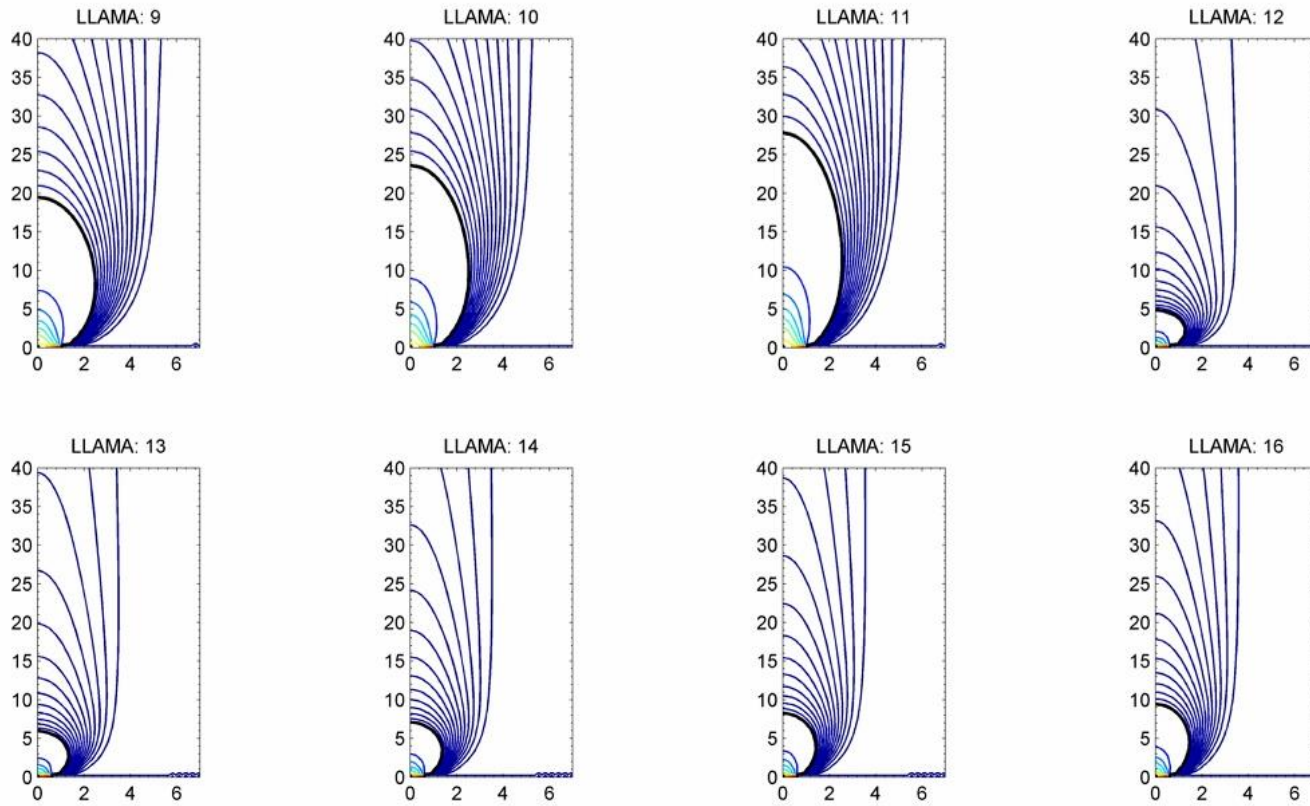


Figura 42. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 1.

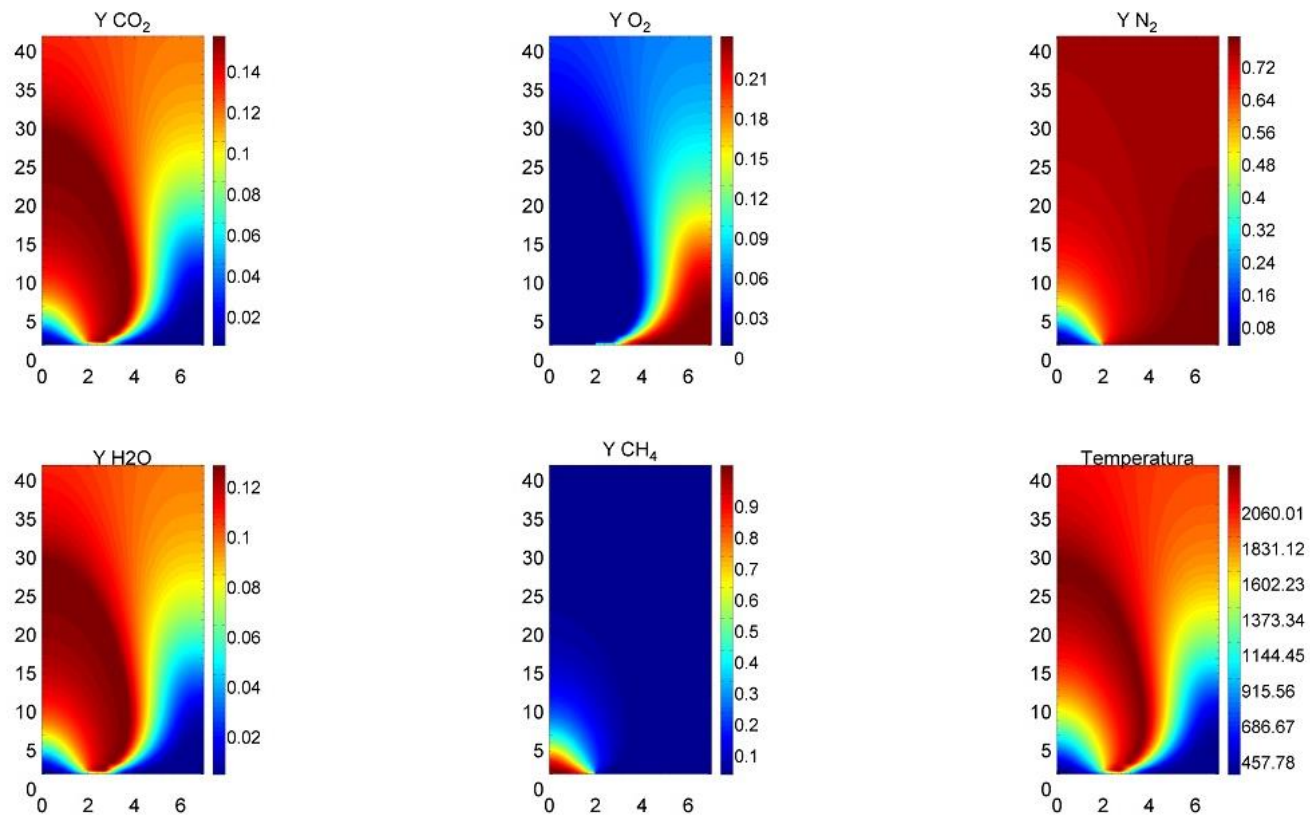


Figura 43. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 2.

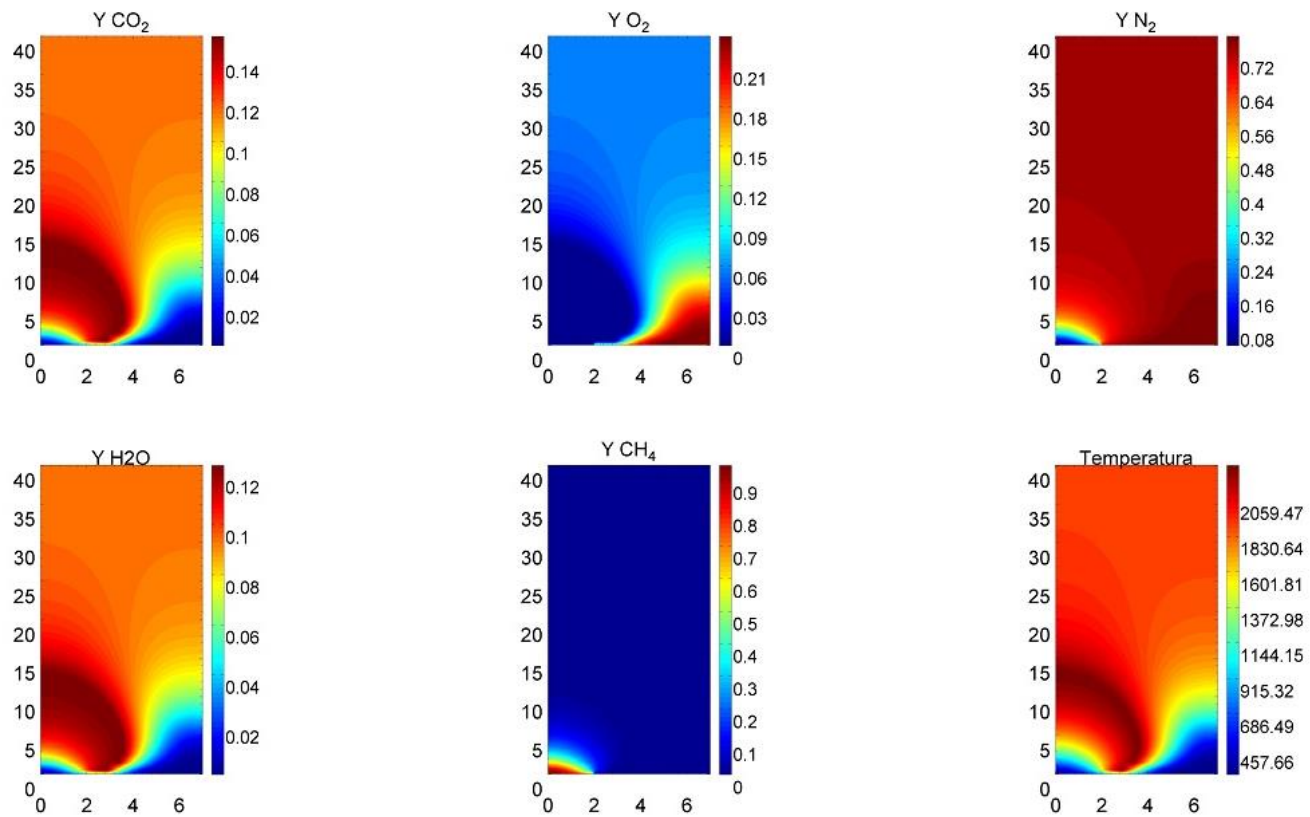


Figura 44. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 3.

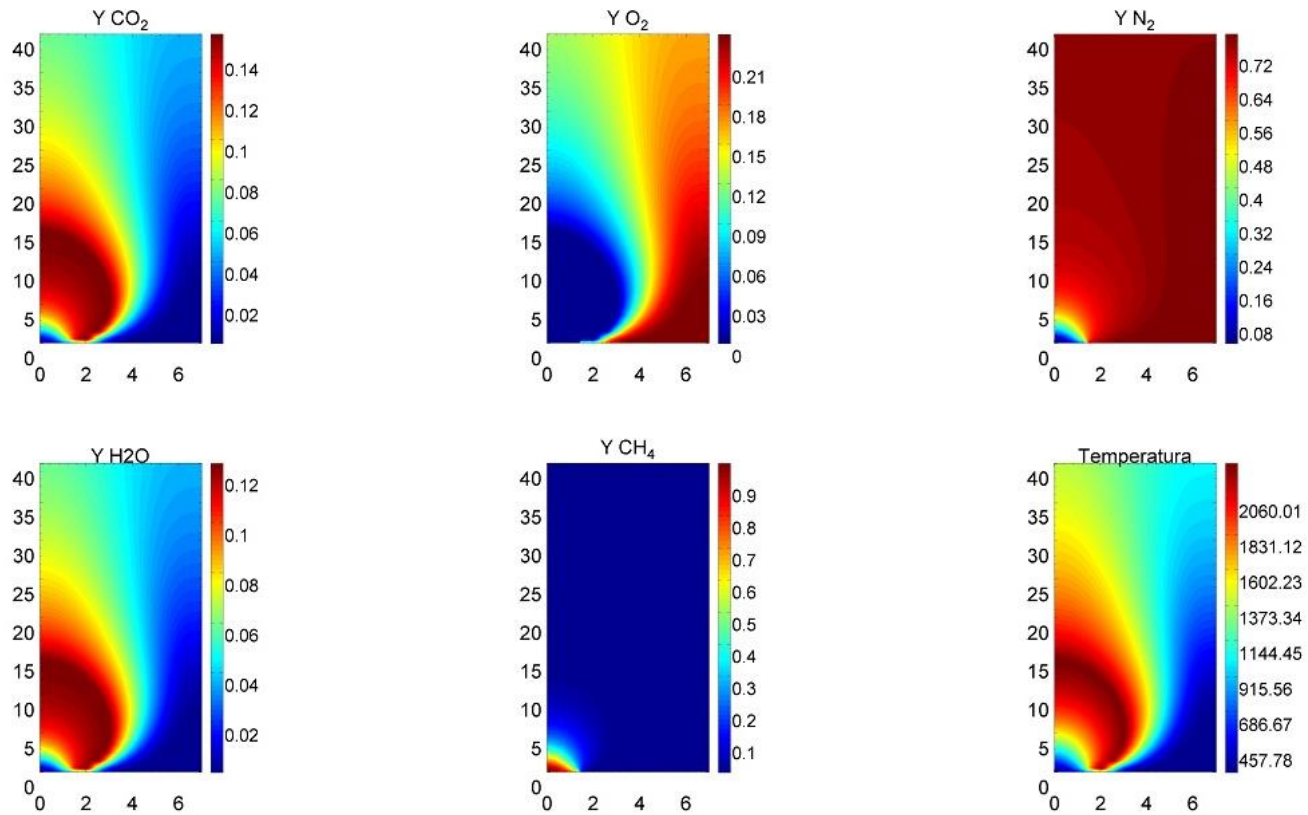


Figura 45. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 4.

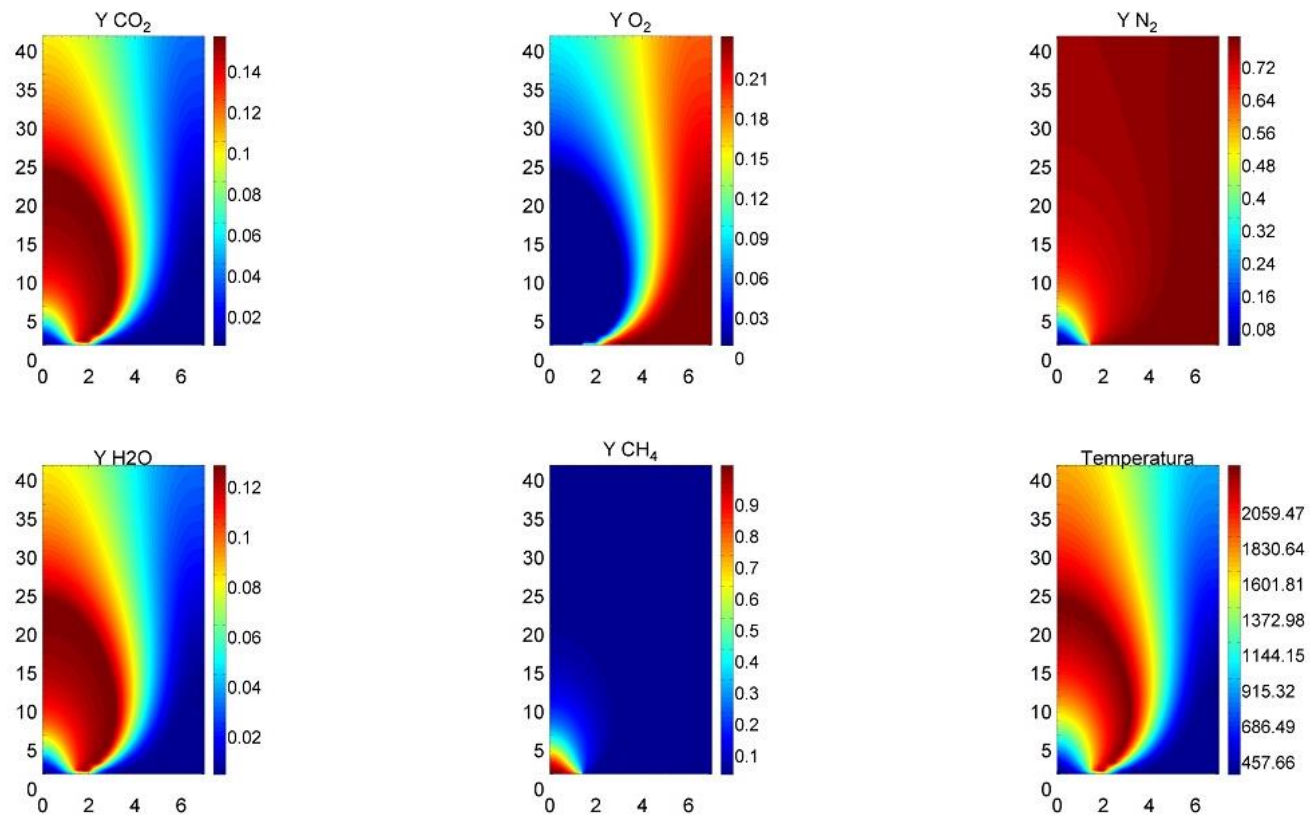


Figura 46. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 5.

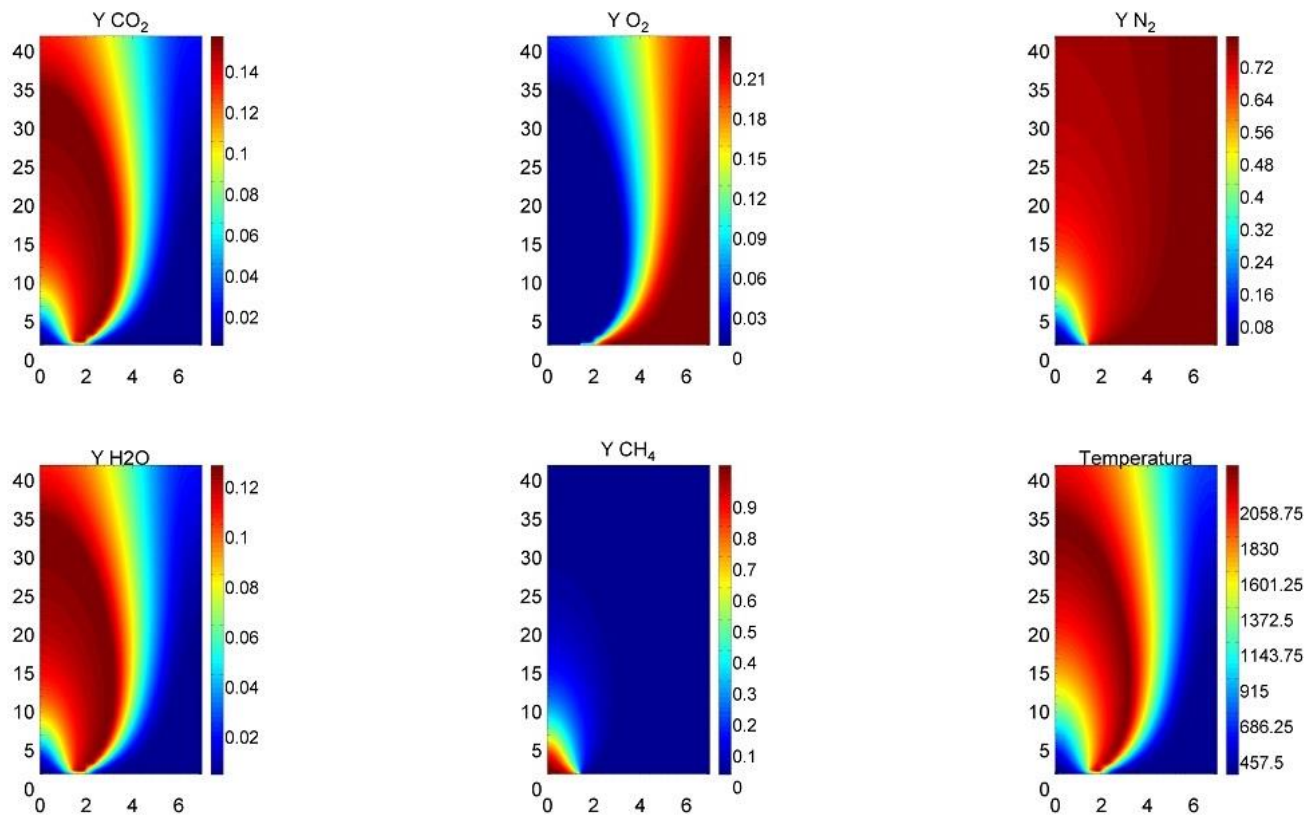


Figura 47. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 6.

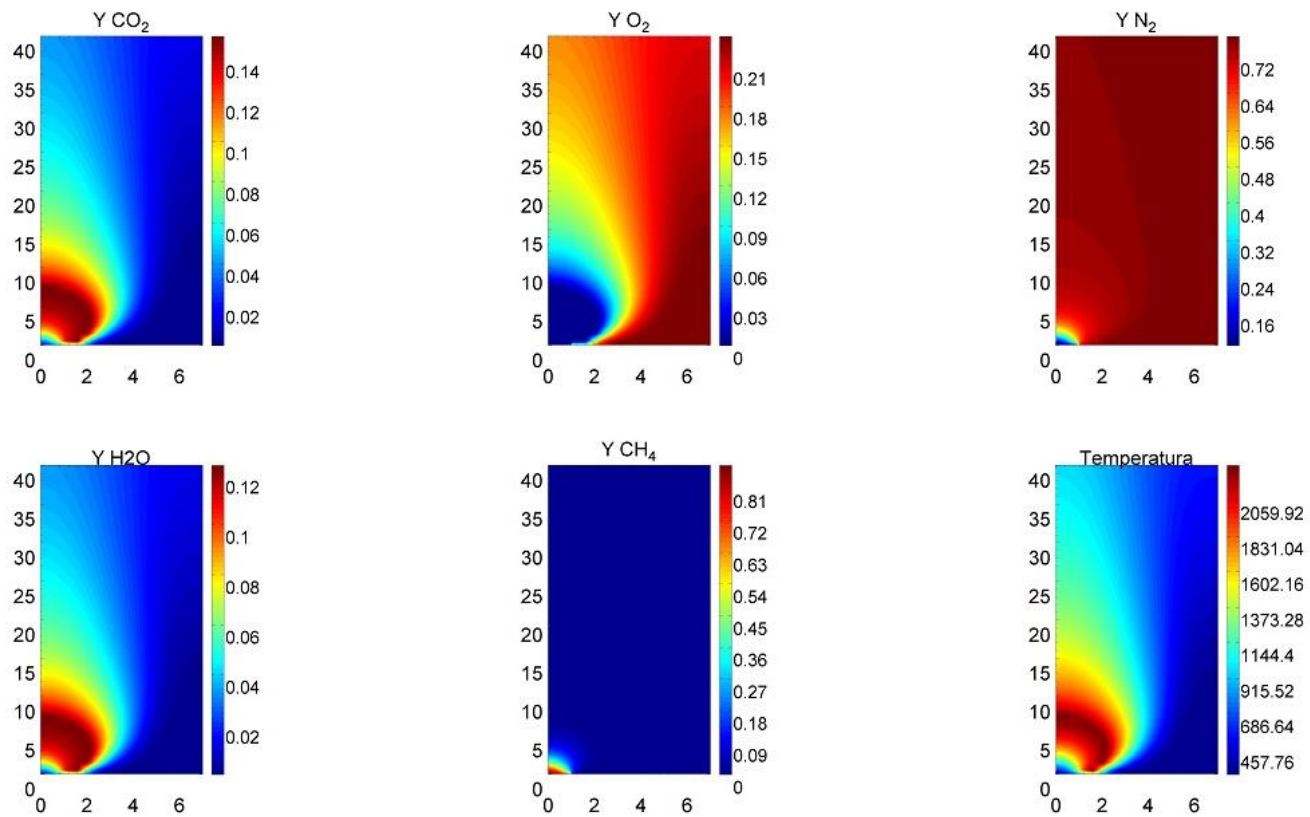


Figura 48. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 7.

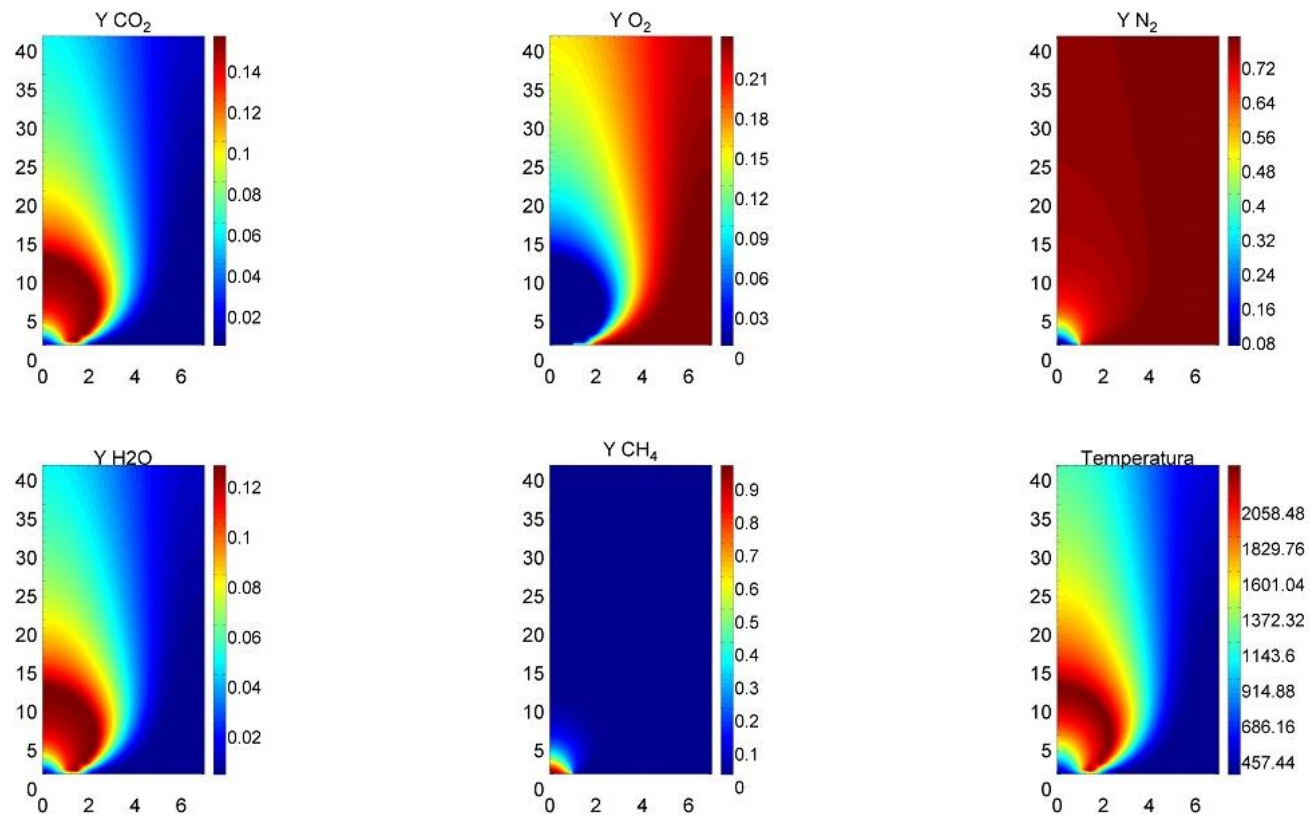


Figura 49. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 8.

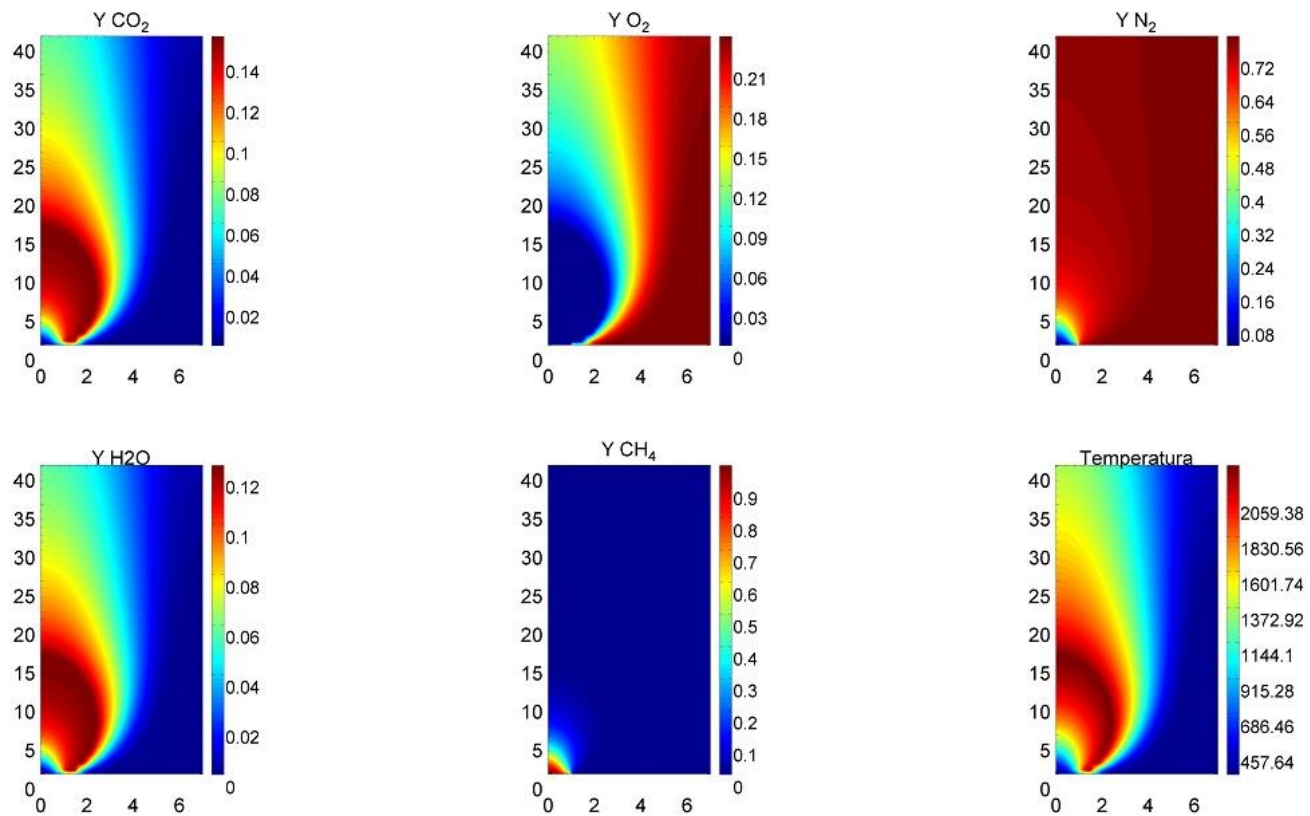


Figura 50. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 9.

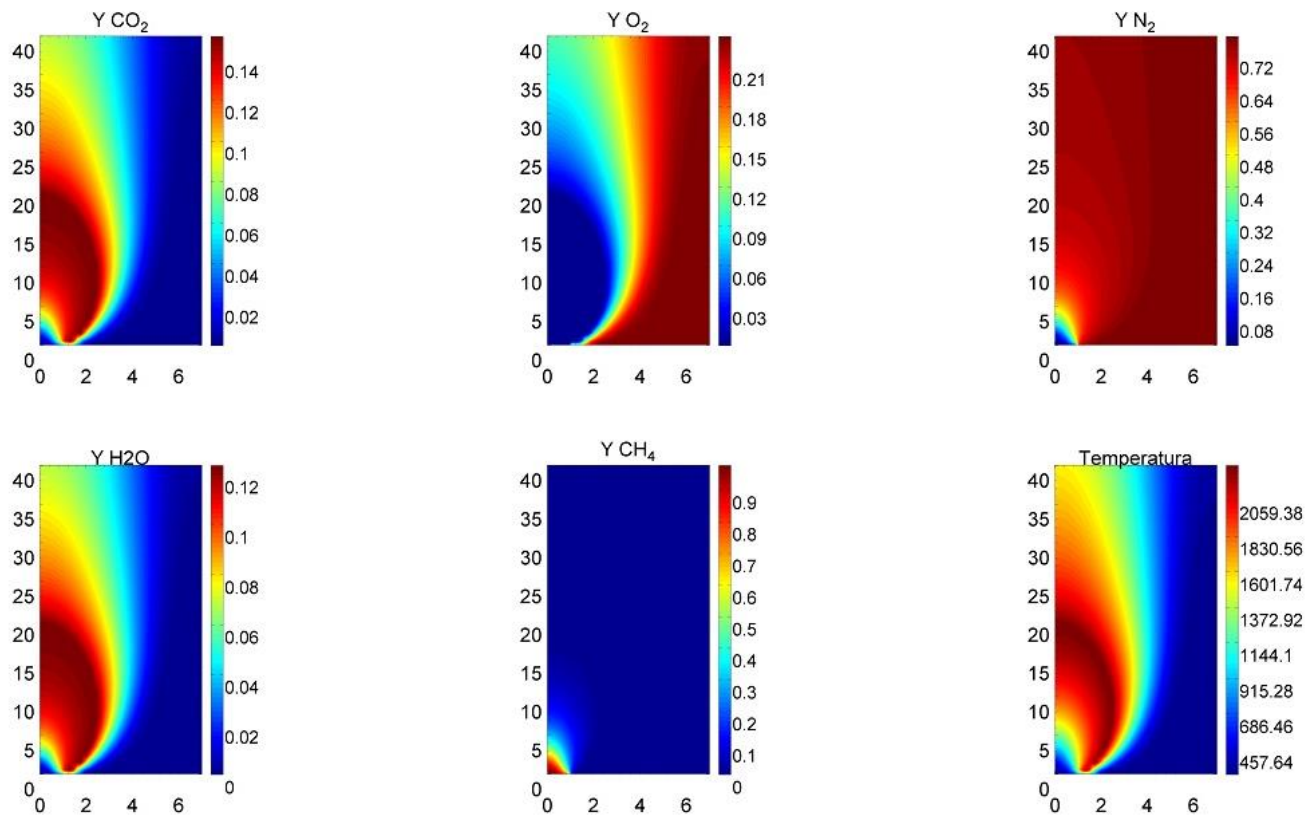


Figura 51. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 10.

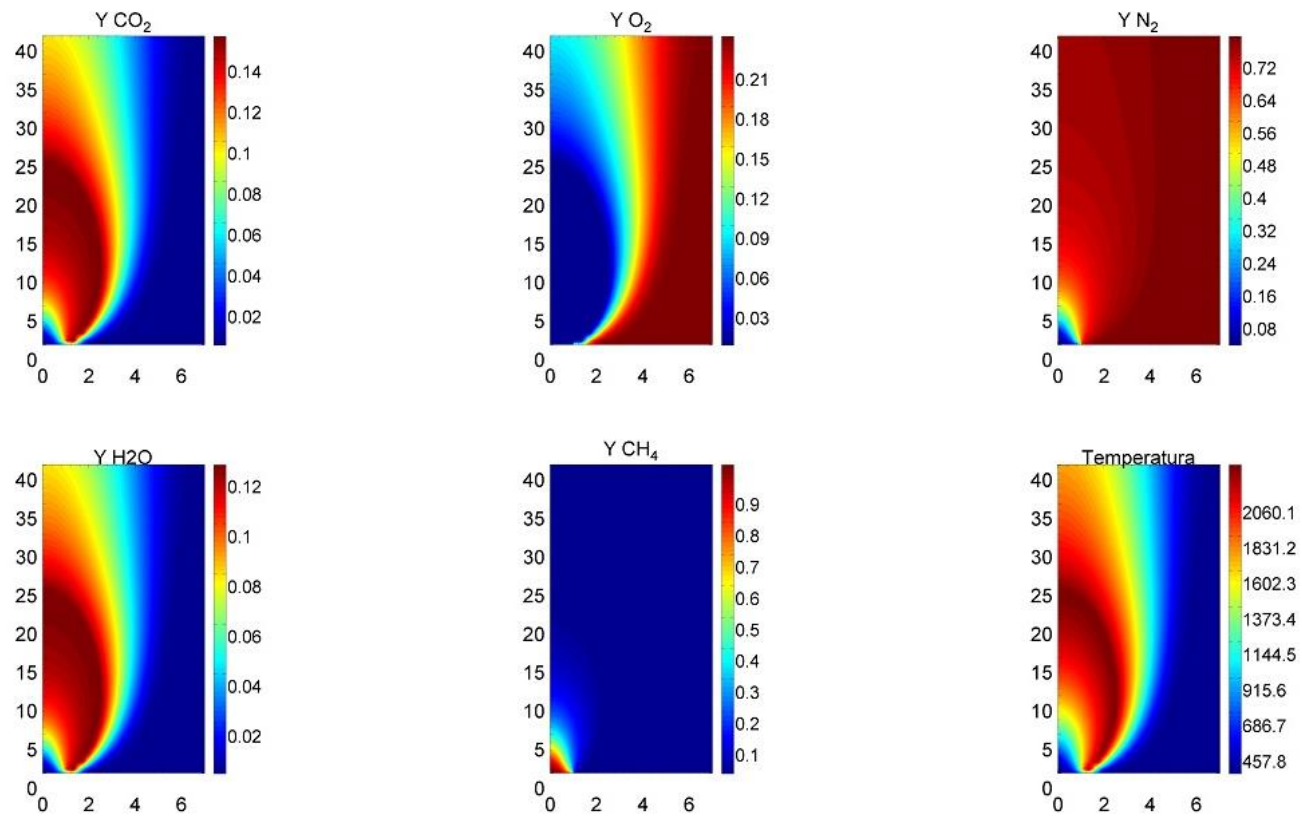


Figura 52. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 11.

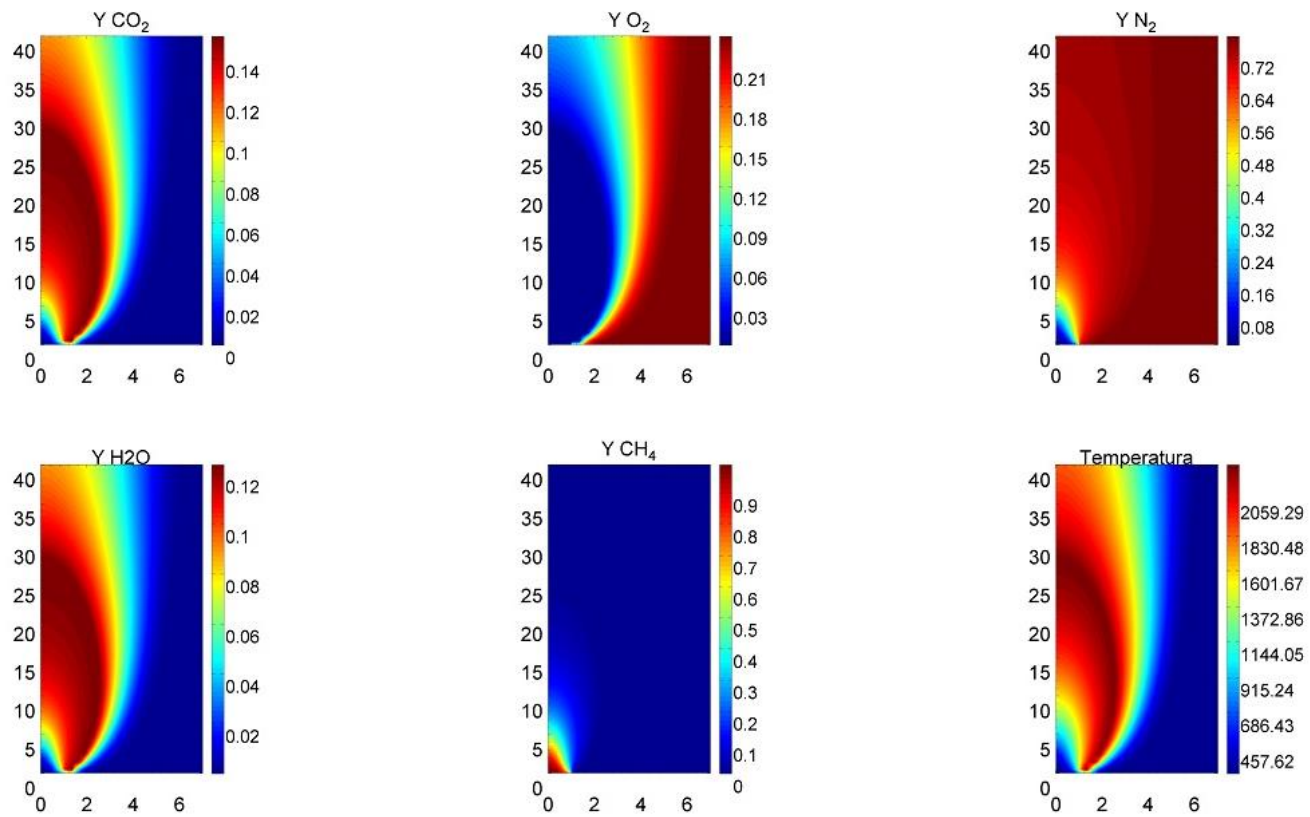


Figura 53. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 12.

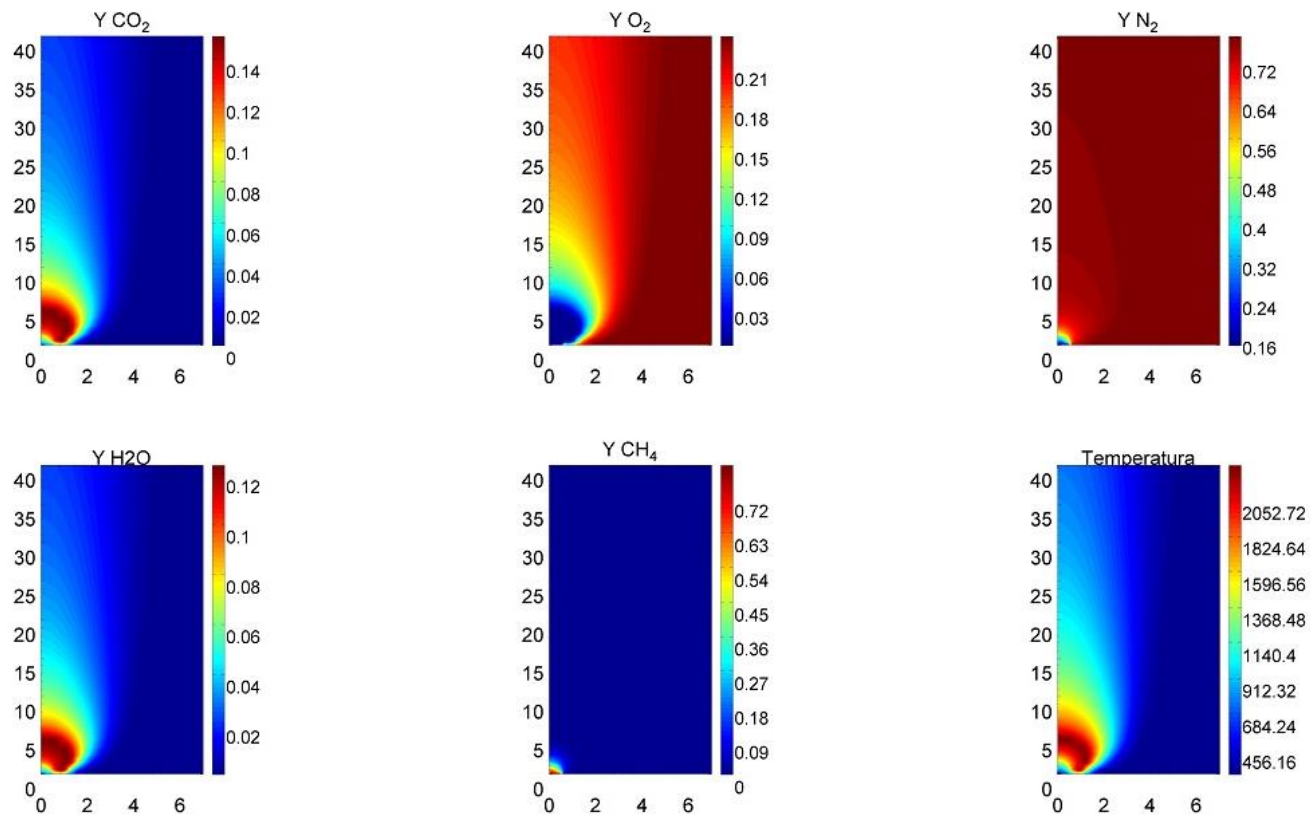


Figura 54. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 13.

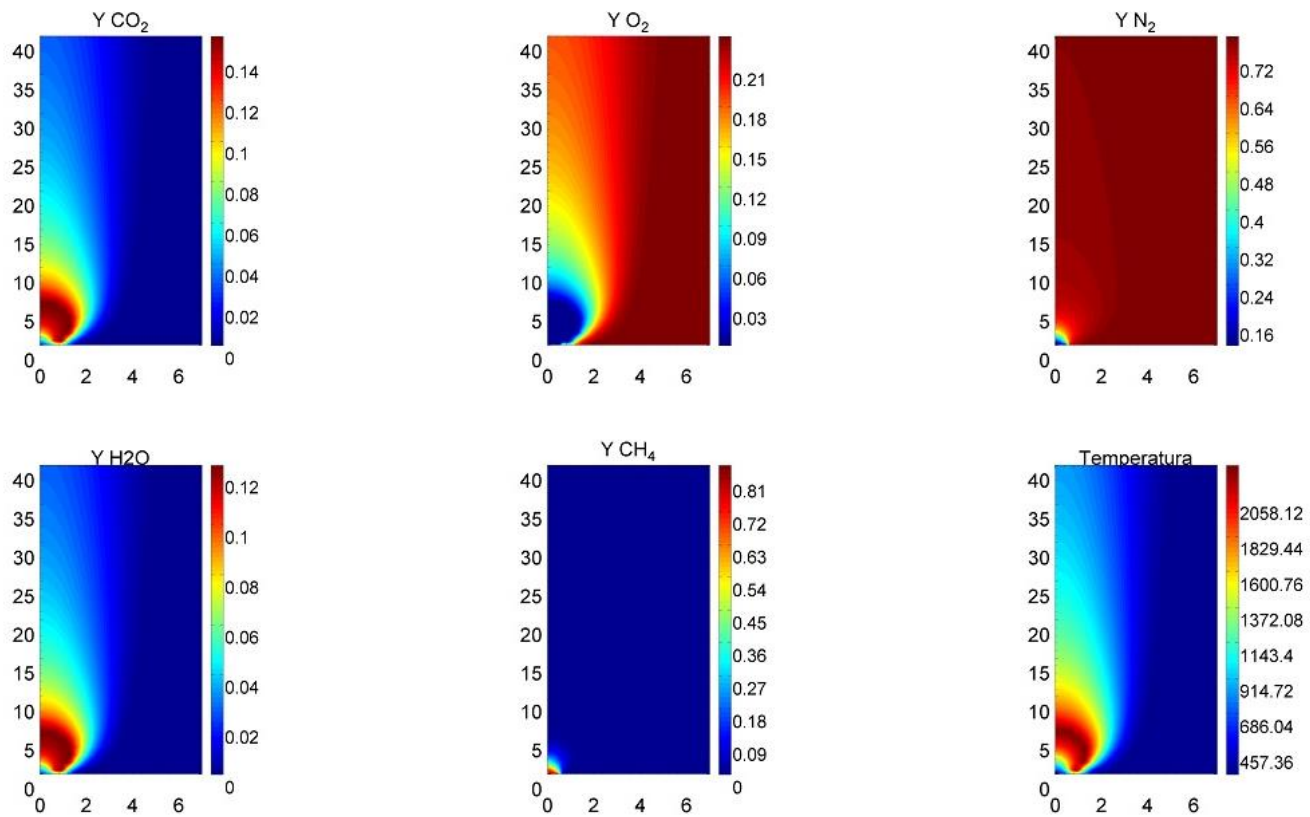


Figura 55. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 14.

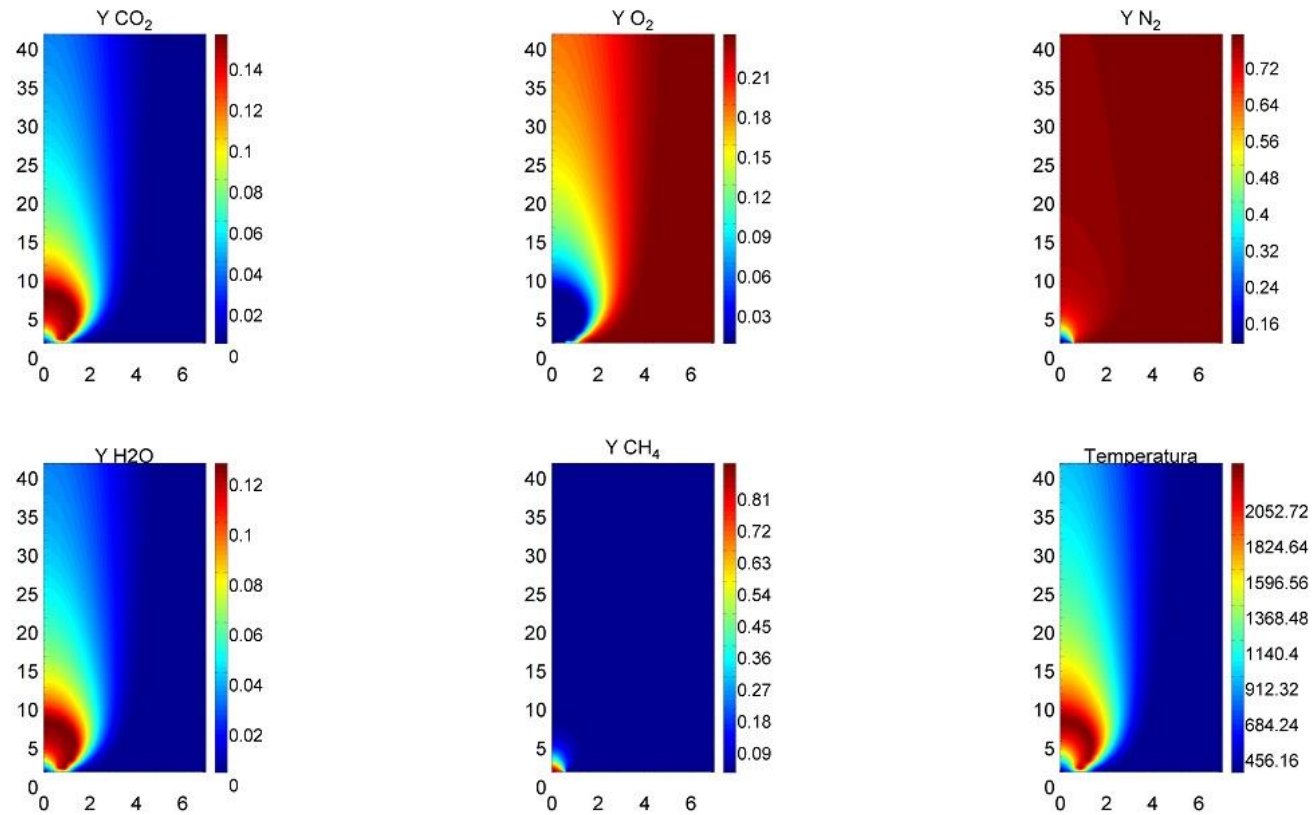


Figura 56. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 15.

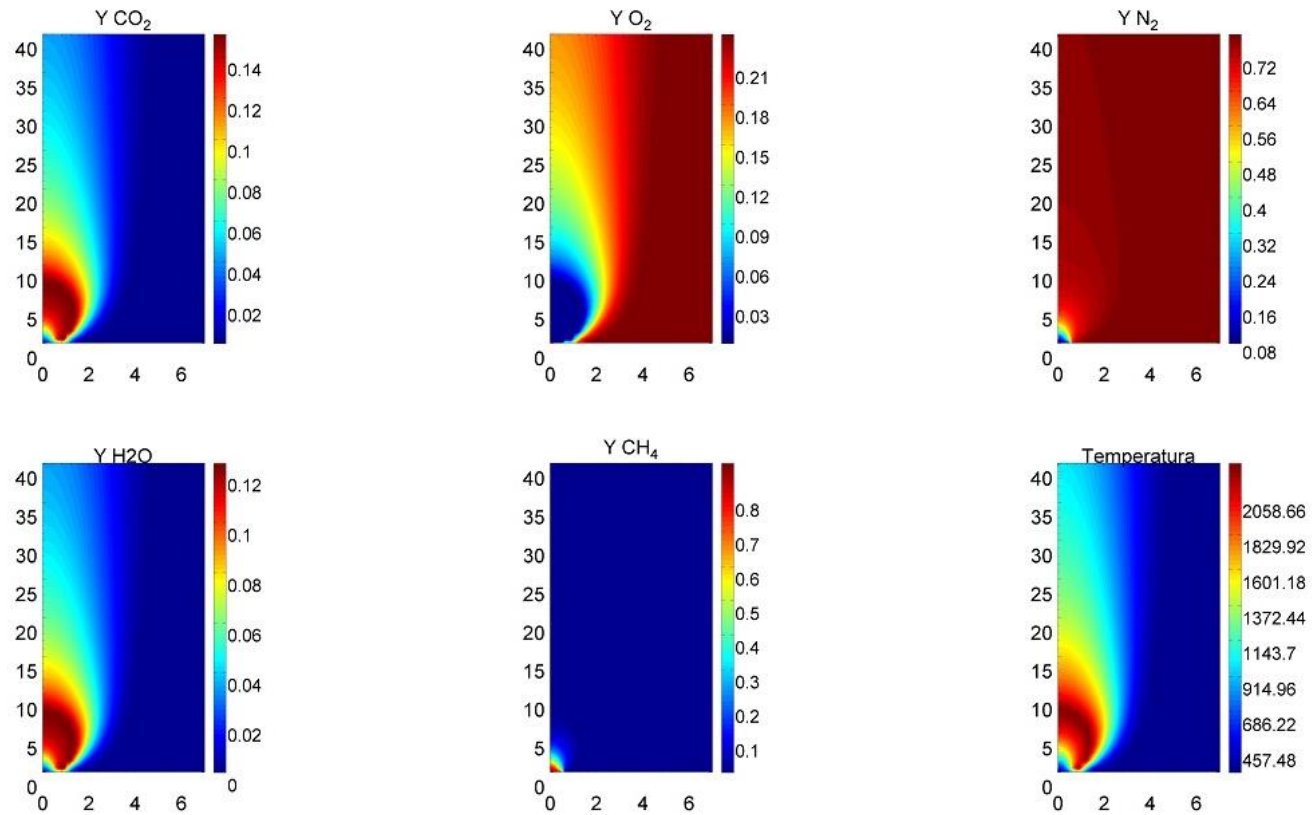
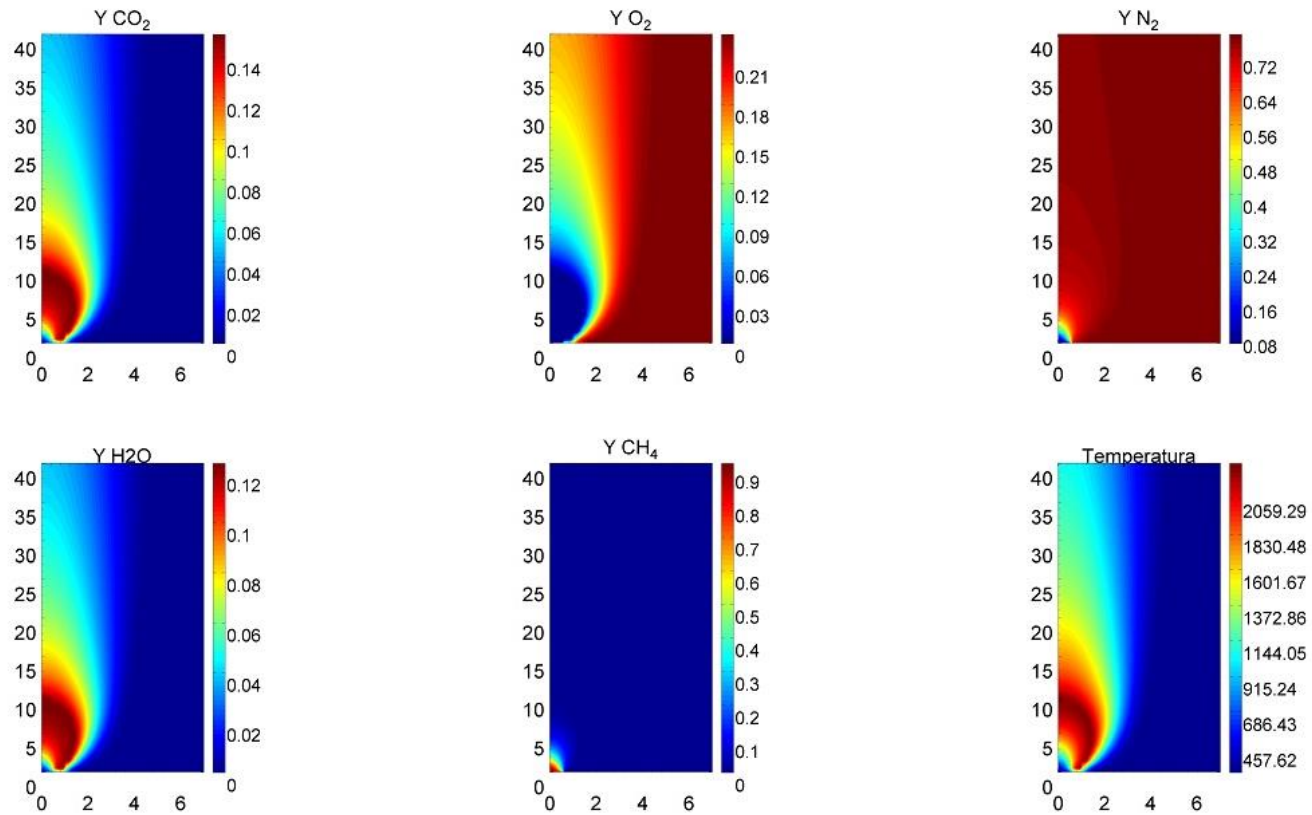


Figura 57. Superficies de nivel para la concentración de especies y la temperatura de la llama 16.



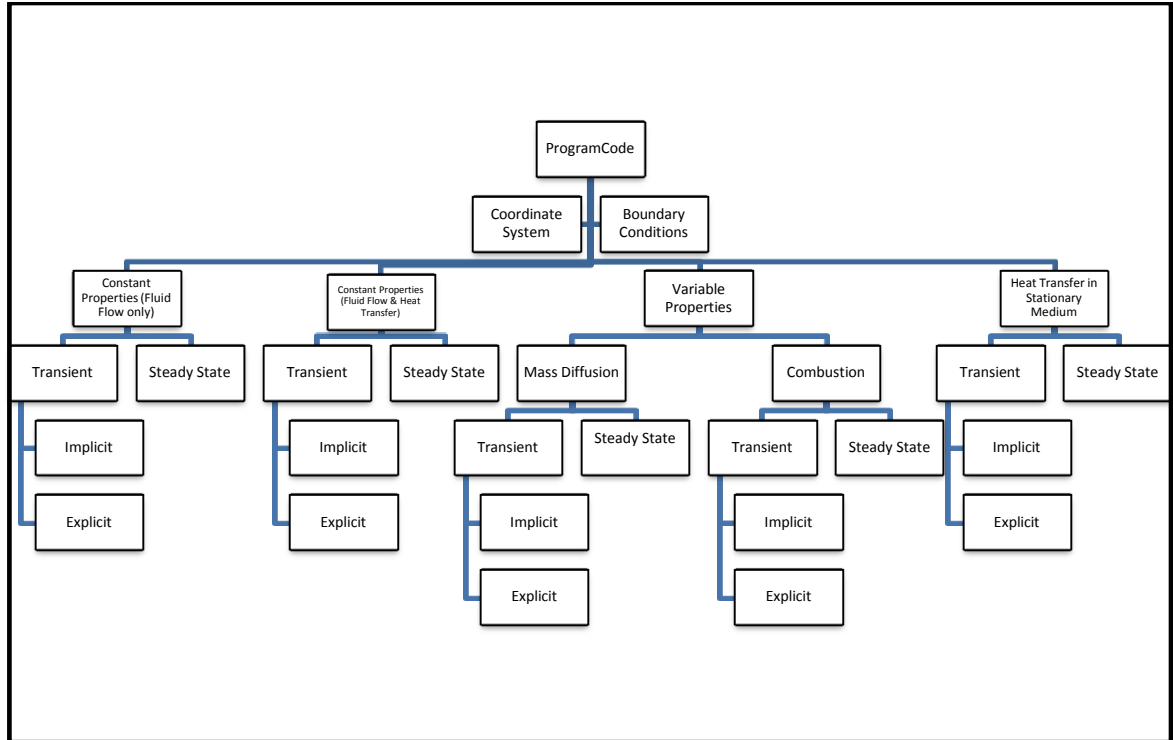
9. INTERFAZ GRÁFICA

Un simulador es un código optimizado, validado, versátil y accesible para un público que no necesariamente está al tanto de los detalles y las características del código, y que por el contrario, está más orientado hacia los resultados y su interpretación. El desarrollo de un código de este tipo es una tarea extremadamente ardua y a todas luces fuera del alcance de este proyecto, sin embargo, como una forma de presentar los resultados de las diversas simulaciones desarrolladas durante el transcurso de este proyecto, en este capítulo se presenta una interface gráfica “amigable” que permite apreciar y comparar los diferentes parámetros de entrada, resultados y variables de monitoreo asociadas a cada uno de los esquemas analizados.

En este proyecto se desarrollaron librerías para la solución transitoria y de estado estable de 4 problemas diferentes, estos son: 1) la solución para los campos de velocidades y presiones para un flujo de propiedades constantes, 2) la solución para los campos de velocidades, presiones y temperaturas para un flujo de propiedades constantes, 3) la solución para los campos de velocidades, presiones, temperaturas y concentraciones de cada especie para un flujo no reaccionante (en frío) de metano y oxígeno, así como para un flujo reaccionante de metano-aire (combustión), y por último 4) se presenta la solución para la distribución de temperaturas en un sólido debido únicamente efectos difusivos. Para todos los casos transitorios es posible escoger entre un algoritmo de solución explícito y uno implícito así como también es posible escoger entre 2 sistemas de coordenadas 2D; cartesianas o cilíndricas (axisimétricas).

El progreso de la simulación puede monitorearse desde la pantalla de resultados, donde se grafican diferentes propiedades de acuerdo con el tipo de problema escogido. La pantalla de resultados también presenta en tiempo real el error máximo en la conservación de cada una de las propiedades relevantes para el problema que se está resolviendo.

Figura 58. Esquema general del código implementado



Cabe recalcar que este código fue enteramente desarrollado por el autor de este proyecto a partir de la bibliografía citada y ha sido implementado modularmente con la intención de ser fácilmente modificable. El código desarrollado en Matlab es abierto y la versión final del mismo se presenta como anexo no impreso. A continuación se presentan en forma de lista las variables más relevantes del código, especificando el tamaño de la matriz en la que se almacenan, esto en función del número de celdas en cada eje ortogonal del dominio, donde 1 representa un escalar mientras que N_x y N_y son el número de celdas en la dirección horizontal y vertical del dominio respectivamente.

A continuación también se presenta una lista de las librerías desarrolladas, junto con una breve descripción de su función, las variables de entrada y las que retorna.

Figura 59. Interfaz gráfica

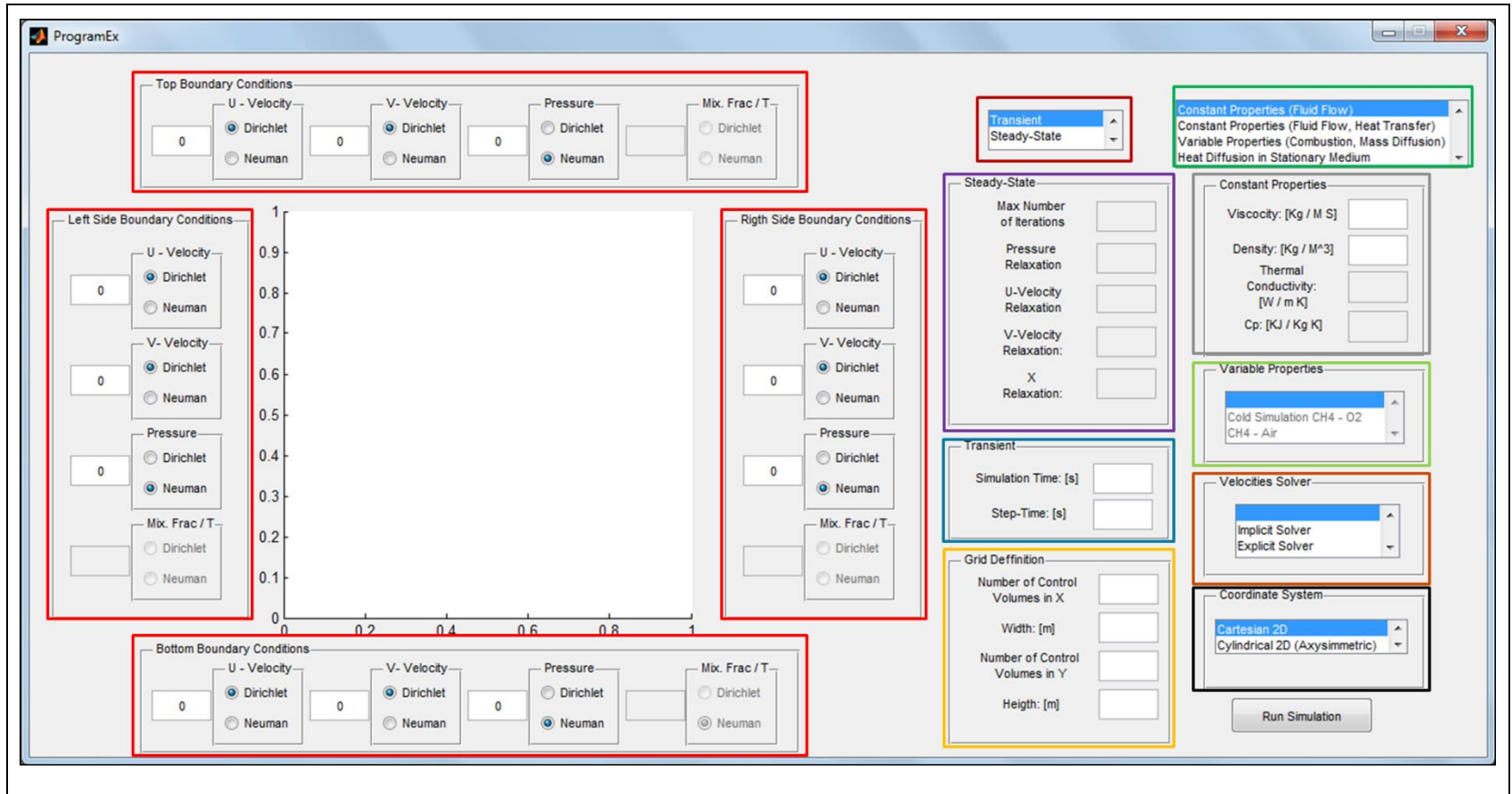


Figura 60. Interfaz gráfica de resultados

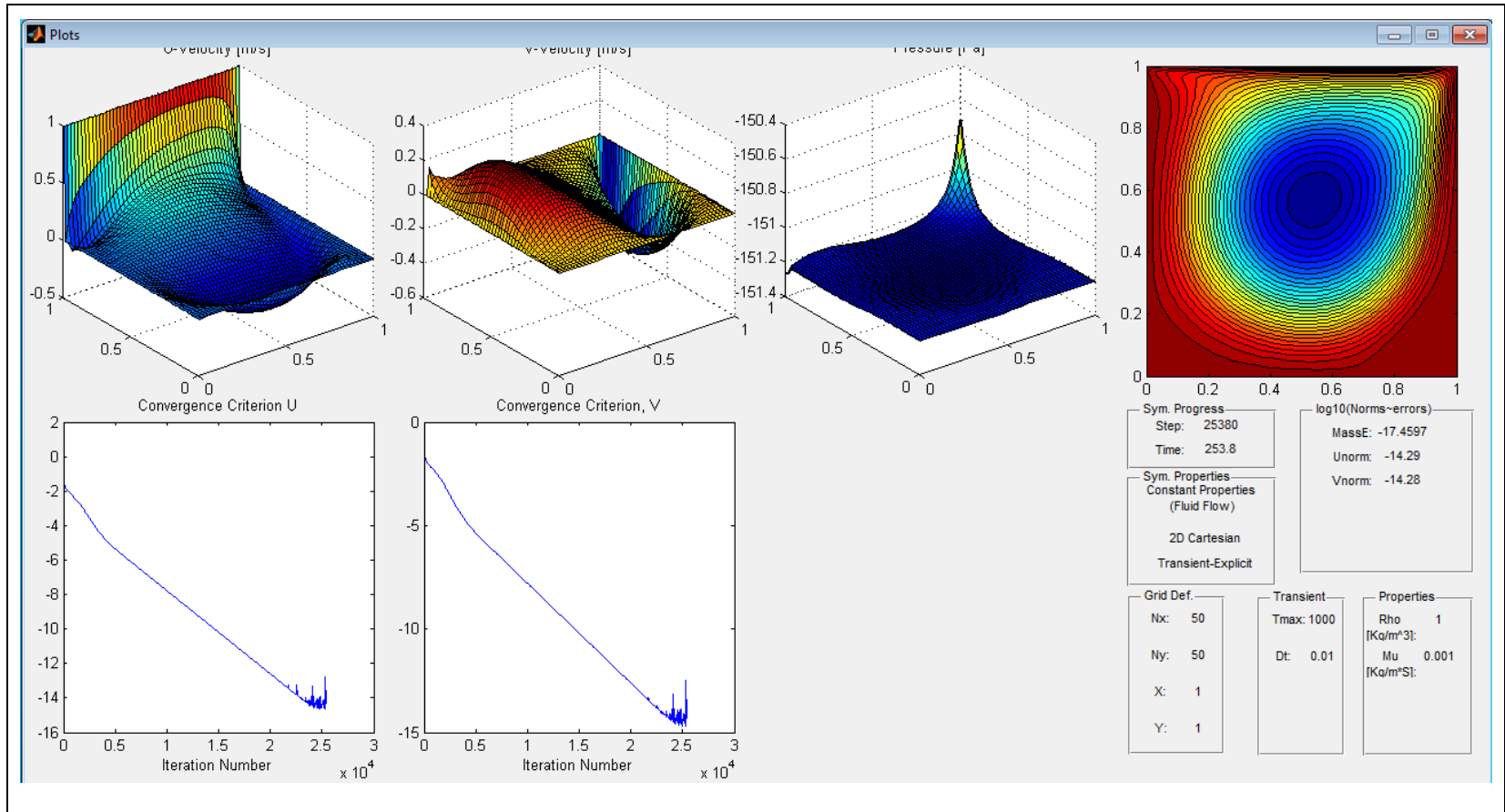









Tabla 23. Descripción de los módulos de la interfaz gráfica

 Condiciones de Frontera:	Permite definir el tipo y el valor de las condiciones de frontera para el dominio.
 Definición de propiedades	Permite definir los valores para la viscosidad, la densidad, la conductividad térmica y el calor específico, cuando estas son consideradas constantes.
 Opciones para Estado Estable	Permite introducir los parámetros de relajación para la velocidad, la presión y la ecuación adicional, bien sea la temperatura o la fracción de mezcla. También permite definir el máximo número de iteraciones.
 Tipo de flujo de Densidad Variable	Permite seleccionar entre un problema de difusión másica en frío y uno en caliente (combustión).
 Tipo de Problema a Resolver	Permite seleccionar entre cuatro diferentes problemas:
 Estado Estable/Transitorio	Permite escoger que tipo de esquema de solución se empleara. Transitorio o estado estable.
 Definición de la malla	Define las dimensiones del dominio y el número de celdas en cada dirección.

<input type="checkbox"/> Opciones para Transitorios	Permite establecer el step-time y el tiempo máximo de simulación para problemas transitorios.
<input type="checkbox"/> Tipo de Solución Transitoria	Permite seleccionar entre una solución transitoria explícita y una solución transitoria implícita.
<input type="checkbox"/> Sistema de coordenadas	Permite escoger entre un sistema de coordenadas cartesianas 2D y un sistema de coordenadas cilíndricas 2D (axisimétricas, r,z).

9.1. DESCRIPCIÓN DE LAS VARIABLES

Variable	Tipo/Tamaño	Función
AREAS		
AxU	(Ny,Nx)	Área de las caras verticales del volumen de control para el componente horizontal de la velocidad. [m]
AyU	(Ny+1,Nx)	Área de las caras horizontales del volumen de control para el componente horizontal de la velocidad. [m]
AxV	(Ny,Nx+1)	Área de las caras verticales del volumen de control para el componente vertical de la velocidad. [m]
AyV	(Ny,Nx)	Área de las caras horizontales del volumen de control para el componente vertical de la velocidad. [m]
AxX	(Ny,Nx+1)	Área de las caras verticales del volumen de control para cualquier variable central. [m]
AyX	(Ny+1,Nx)	Área de las caras horizontales del volumen de control para cualquier variable central. [m]
VARIABLES DE FLUJO		
U	(Ny+2,Nx+1)	Componente horizontal de la velocidad [m/S]
V	(Ny+1,Nx+2)	Componente vertical de la velocidad [m/S]
P	(Ny+2,Nx+2)	Presión hidrodinámica [Pa]
T	(Ny+2,Nx+2)	Temperatura [K]
PROPIEDADES TERMO-FÍSICAS		
rho	(Ny+2,Nx+2)	Densidad [Kg/m ³]
Mu	(Ny+2,Nx+2)	Viscosidad [Kg/m-S]
K	(Ny+2,Nx+2)	Conductividad térmica [W/m-K]

Cp	(N_y+2, N_x+2)	Calor específico [KJ/Kg-K]
-----------	------------------	----------------------------

VARIABLES PARA SOLUCIÓN IMPLÍCITA

CMu	$(N_y*(N_x-1), N_y*(N_x-1))$	Matriz para la solución implícita de la componente horizontal de la velocidad
------------	------------------------------	---

CMsu	$(N_y*(N_x-1), 1)$	RHS para U
-------------	--------------------	------------

CMv	$((N_y-1)*N_x, (N_y-1)*N_x)$	Matriz para la solución implícita de la componente vertical de la velocidad
------------	------------------------------	---

CMsv	$((N_y-1)*N_x, 1)$	RHS para V
-------------	--------------------	------------

CMp	(N_y*N_x, N_y*N_x)	Matriz para la solución implícita de la presión
------------	----------------------	---

CMsp	$(N_y*N_x, 1)$	RHS para la presión
-------------	----------------	---------------------

CMx	(N_y*N_x, N_y*N_x)	Matriz para la solución implícita de X
------------	----------------------	--

CMsx	$(N_y*N_x, 1)$	RHS para el parámetro adicional
-------------	----------------	---------------------------------

PARÁMETROS DE RELAJACIÓN

Ur	1	Factor de relajación para la solución de la componente horizontal de la velocidad
-----------	---	---

Vr	1	Factor de relajación para la solución de la componente vertical de la velocidad
-----------	---	---

Pr	1	Factor de relajación para la solución de la presión
-----------	---	---

Xr	1	Factor de relajación para la solución de X
-----------	---	--

VARIABLES PARA LA SOLUCIÓN DE ESTADO ESTABLE

Ua, Uaa	(N_y+2, N_x+1)	Variables auxiliares para U
----------------	------------------	-----------------------------

Va, Vaa	(N_y+1, N_x+2)	Variables auxiliares para V
----------------	------------------	-----------------------------

Xa	(N_y+2, N_x+2)	Variables auxiliares para X
-----------	------------------	-----------------------------

DEFINICIÓN DEL DOMINIO		
Nx	1	Número de volúmenes de control en la dirección horizontal de la malla no escalonada
Ny	1	Número de volúmenes de control en la dirección vertical de la malla no escalonada
Xd	1	Ancho o diámetro del dominio físico
Yd	1	Altura del dominio físico
Dx	1	Separación entre nodos en X
Dy	1	Separación entre nodos en Y
VARIABLES DE MONITOREO		
UnormV	Varía con el número de iteraciones	Norma/error en la solución de la ecuación de momentos en X
VnormV	Varía con el número de iteraciones	Norma/error en la solución de la ecuación de momentos en Y
XnormV	Varía con el número de iteraciones	Norma/error en la solución de la ecuación para X
TnormV	Varía con el número de iteraciones	Norma/error en la solución de la ecuación de difusión pura
Coeficientes de discretización		
auE, auW, auN, auS, auP, Su,	(Ny,Nx-1)	Coeficientes de discretización para la ecuación de los momentos en X
avE, avW, avN, avS, avP, Sv	(Ny-1,Nx)	Coeficientes de discretización para la ecuación de los momentos en Y

apE, apW, apN, apS, apP, Sp	(Ny,Nx)	Coefficientes de discretización para la ecuación de la presión
axE, axW, axN, axS, axP, Sx	(Ny,Nx)	Coefficientes de discretización para la ecuación de la variable adicional X
CONDICIONES DE FRONTERA		
BCu, BCv, BCp, BCx,	Cell array: {4,2}	Almacena el tipo y valor de la condición de frontera para cada frontera del dominio físico

9.2. DESCRIPCIÓN DE LAS LIBRERÍAS

librería	función	Retorna	Entradas
Area.m	Calcular las áreas de cada volumen de control en coordenadas cartesianas 2D y coordenadas cilíndricas axisimétricas.	AxU,AyU,AxV,AyV, AxX,AyX	Xd,Yd,Nx,Ny,Dx,Dy,CoordS yst
BoundaryConditions.m	Impone las condiciones de frontera tipo I y II para U, V y P.	U, V, P	U, V, P, Dx, Dy, BCu, BCv, BCp
CheckVariables.m	Verifica la conservación de masa, monitorea la convergencia y los errores.	S	U, V, P, X, T, rho, Nx, AxX, AyX, AxU, AyU, AxV, AyV, mu, K, Cp, U0, V0, X0, T0
CoefficientCalculation.m	Calcula los coeficientes para las ecuaciones de los momentos utilizando el método Upwind ne lugar del método Hybrid. (No se utiliza en el código)	auE, auW, auN, auS, auP, Su, avE, avW, avN, avS, avP, Sv	Dx, Dy, mu, rho, U, V, P
CoefficientMatrix.m	Llena la matriz y el vector RHS para la solución de implícita de U, V, P y X.	CM, CMs	Nx, Ny, F, CM, CMs, acE, acW, acN, acS, acP, Sc
myaa.m	Funcion para mejorar la calidad de las gráficas en matlab	-	-
PressureBoundaryCondition.m	Impone las condiciones de frontera para la solución de la ecuación de	apE, apW, apN, apS, apP, Sp	BCp, apE, apW, apN, apS, apP, Sp

Poisson para la presión			
PressureCoefficientCalculation.m	Calcula los coeficientes para la solución de la ecuación de Poisson	apE, apW, apN, apS, apP, Sp, dX, dY	Dx, Dy, rho, Ua, Va, auP, avP, AxX, AyX, AyU, AyV
ProgramCode.m	Programa central	TODAS LAS VARIABLES	Dx Dy Up Vp Pp Tp SL CMax n Nmax Np
PropertiesUpdateCold.m	Calcula las propiedades termo físicas para la simulación no reactiva de metano-oxígeno	MUmix, CPmix, Kmix, rho	T, X
PropertiesUpdateHot.m	Calcula las propiedades termo físicas para la simulación reactiva de metano-aire	MUmix, CPmix, Kmix, rho	T, X
TCoefficients.m	Calcula los coeficientes para la solución de la ecuación de difusión pura	aTE, aTW, aTN, aTS, aTP, aT0	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, Cp, rho
Texplicit.m	Algoritmo de solución explícito para la difusión pura transitoria	T	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, T, BCx, Cp, rho
Timplicit.m	Algoritmo de solución implícito para la difusión pura transitoria	T	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, T, BCx, Cp, rho, CMx, CMsx, Nx, Ny
TRelaxed.m	Algoritmo de solución para la difusión pura en estado estable	T	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, T, BCx, Cp, rho
VelocityBoundaryConditionsImplicit.m	Impone las condiciones de frontera para la solución de las ecuaciones de los momentos cuando se resuelven de forma transitoria e implícita.	auE, auW, auN, auS, auP, Su, avE, avW, avN, avS, avP, Sv	Dx, Dy, BCu, BCv, auE, auW, auN, auS, auP, Su, avE, avW, avN, avS, avP, Sv
VelocityCoefficientCalculationHybrid.m	Calcula los coeficientes para las ecuaciones de los momentos utilizando el método Hybrid	auE, auW, auN, auS, auP, au0, Su, avE, avW, avN, avS, avP, av0, Sv	Dx, Dy, Dt, mu, rho, U, V, P, Msu, Msv, AxU, AyU, AxV, AyV, AxX, AyX
VelocityExplicit.m	Algoritmo de solución explícito para un flujo laminar transitorio.	U,V,P	U,Ua,V,Va,P,Pa,Nx,Ny,Dx,Dy,Dt,mu,rho,BCu,BCv,BCp,CMp,CMsp,AxU,AyU,AxV,AyV,AxX,AyX
VelocityImplicit.m	Algoritmo de solución implícito para un flujo laminar transitorio.	U,V,P	U, Ua, V, Va, P, Pa, Nx, Ny, Dx, Dy, Dt, mu, rho, BCu, BCv, BCp, CMp, CMsp, AxU, AyU, AxV, AyV, AxX, AyX, CMu, CMsu, CMv, CMsv
VelocityRelaxed.m	Algoritmo de solución para un flujo	U,V,P	U,Ua,Uaa,V,Va,Vaa,P,Pa,Nx,Ny,Dx,Dy,Dt,mu,rho,BCu,

	laminar en estado estable.		BCv,BCp,CMp,CMsp,AxU,AyU,AxV,AyV,AxX,AyX,Ur,Vr,Pr
XBoundaryConditionsImplicit.m	Impone las condiciones de frontera para la solución de la ecuación de transporte para cualquier variable almacenada en los nodos centrales cuando se resuelve de forma transitoria e implícita.	apE, apW, apN, apS, apP, Sp	Dx, Dy, BCp, apE, apW, apN, apS, apP, Sp
XCoefficients.m	Calcula los coeficientes para la solución de la ecuación de transporte para cualquier variable almacenada en los nodos centrales	aXE, aXW, aXN, aXS, aXP, aX0	Dx, Dy, Dt, rho, U, V, K, Cp, AxX, AyX
XExplicit.m	Algoritmo de solución transitorio explícito para cualquier variable almacenada en los nodos centrales.	X	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, X, BCx, Cp, rho, U, V
XImplicit.m	Algoritmo de solución transitorio implícito para cualquier variable almacenada en los nodos centrales.	X	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, X, BCx, Cp, rho, U, V, CMx, CMsx, Nx, Ny
XRelaxed.m	Algoritmo de solución en estado estable para cualquier variable almacenada en los nodos centrales.	X	Dx, Dy, Dt, AxX, AyX, K, X, BCx, Cp, rho, U, V, Xr
BC.fig	Interfaz gráfica para la definición de las condiciones de frontera	-	-
Plots.fig	Interfaz gráfica para mostrar los resultados principales de la simulación	-	-
ProgramEx.fig	Interfaz gráfica del programa principal	-	-

10. CONCLUSIONES

- 1) En este trabajo se implementó un algoritmo basado en el método de los volúmenes finitos para la solución numérica de los perfiles de temperatura, presión, velocidad, densidad y concentración de cada una de las especies mayores involucradas en la combustión de metano, en una llama laminar no-premezclada en flujo paralelo. El algoritmo implementado en este proyecto es conocido como el modelo “mixed-is-burnt” también conocido como “conserved-scalar approach”, que permite una simplificación razonable del sistema de ecuaciones diferenciales parciales resultante, preservando los aspectos fundamentales del fenómeno a simular.
- 2) Para la solución numérica, tanto en estado estable como transitorio, en coordenadas cartesianas 2D y axisimétricas, se desarrolló un código modular vectorizado en Matlab. El código consta de 39 librerías o funciones, incluyendo aquellas requeridas para presentar los resultados, graficar, monitorear los errores y la convergencia del algoritmo.
- 3) El modelo desarrollado fue validado comparando las alturas predichas numéricamente para 16 llamas con parámetros seleccionados a priori, con los resultados de una correlación teórica calibrada con parámetros experimentales provista por Roper et. al. [20,21]. También se comparó la temperatura promedio de cada llama con la temperatura de llama adiabática basada en la relación de equivalencia global para cada llama, los resultados de ambos modelos para las 2 validaciones concuerdan satisfactoriamente, con errores inferiores al 10% en casi todos los casos.
- 4) Se desarrolló una interfaz gráfica en Matlab para la presentación amigable de los resultados de este proyecto, la cual se incluye como anexo no impreso.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] BAUKAL, Charles. *The John Zink combustion handbook*, 1st ed. Boca Raton, FL. CRC Press, 2001, 800 p.
- [2] BAUKAL, Charles. *John Zink combustion Handbook, 3 Volume Set*, 2nd ed. Boca Raton, FL. Taylor & Francis Group, 2013.
- [3] BAUKAL, Charles. *Computational fluid dynamics in industrial combustion*. Boca Raton, FL: CRC Press, 2001, 648 p.
- [4] BEJAN, A. *Heat transfer*. New York. John Wiley & Sons, 1993, 704 p.
- [5] BIRD, R. B., STEWART W. E., and LIGHTFOOT, E. N., *Transport phenomena*, 2nd ed. New York. J. Wiley, 2007, 905 p.
- [6] CENGEL, Y. *Heat and mass transfer: Fundamentals & applications*. New York. McGraw-Hill, 2011, 924 p.
- [7] ERTURK, E., CORKE, T. C. and GÖKÇÖL, C. "Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers," *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 48, no. 7, 2005, p. 747–774.
- [8] GRAEBEL W. P., *Advanced fluid mechanics*, 1st ed. Burlington, MA. Academic Press, 2007, 368 p.
- [9] GREENBERG , M. *Advanced engineering mathematics*, 2nd ed. Upper Saddle River, N.J: Prentice Hall, 1998, p. 1324 p.
- [10] HAN J.C. *Analytical heat transfer*. Boca Raton, FL. CRC Press, 2012, 326 p.
- [11] [Http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/), "The Gas Research Institute, GRI-Mech 3.0".
- [12] KEE R. J. et. al. "CHEMKIN Release 4.0.2, Reaction design," San Diego, Ca, 2005.
- [13] KEE R. J .et. al., "A Fortran computer code package for the evaluation of gas-phase, multicomponent transport properties", 1998.
- [14] KUO, K. *Principles of combustion*, 1st ed. Hoboken, NJ. John Wiley, 2005, 760 p.

- [15] KUO, K. *Fundamentals of turbulent and multiphase combustion*. Hoboken, N.J. Wiley, 2012, 912 p.
- [16] ORAN, E. *Numerical simulation of reactive flows*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000, 552 p.
- [17] PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: McGraw-Hill, 1980, 205 p.
- [18] PETRILA ,T. *Basics of fluid mechanics and introduction to computational fluid dynamics*. New York: Springer, 2005, 520 p.
- [19] PRUD'HOMME, R. *Flows of reactive fluids*. Boston. Springer Science+Business Media, LLC, 2010, 476 p.
- [20] ROPER F. G. "The prediction of laminar jet diffusion flames sizes: Part I. Theoretical model," *Combust. Flame*, vol. 29, 1977, p. 219–226.
- [21] ROPER, F. G., CUNNINGHAM, Smith. "The prediction of laminar jet diffusion flames sizes: Part II. Experimental Verification," *Combust. Flame*, vol. 29, 1977, p. 277–234.
- [22] TURNS, S. *An introduction to combustion: Concepts and applications*. New York: McGraw-Hill, 2012.
- [23] VERSTEEG, H. K. and MALALASEKRA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. Harlow, England. Pearson Education Ltd, 2007, 503 p.
- [24] WARNATZ, J. *Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation Formation*, 4th ed. Berlin. Springer, 2006, 378 p.