

AVANCES EN EL MODELADO DE LLAMAS DE DIFUSION TURBULENTA

Brizuela, Eduardo A.

Unidad de Estudios Sobre Conversión de la Energía (UESCE), Facultad de Ingeniería, UNLP, Calle 1 esq. 47, (1900) La Plata, Argentina. E-mail: ebrizuela@ing.unlp.edu.ar

Palabras claves: gas natural, combustión turbulenta, CMC, PMF.

Introducción

La combustión del gas natural en aire es un proceso de suma importancia, particularmente en nuestro medio y es necesario desarrollar las herramientas teóricas para su análisis y diseño.

El estudio de la combustión se realiza mediante experimentos físicos y numéricos, complementarios y de similar importancia. Los experimentos físicos tienen la gran desventaja de su alto costo, rigidez y dificultad de instrumentación (la combustión es un medio muy hostil). El experimento numérico es de relativamente bajo costo, gran flexibilidad y todas las variables son observables, pero usualmente se omiten ciertas leyes o efectos físicos (radiación de gases, difusión multicomponente), por ignorancia o falta de poder computacional. Por esto es que hay grupos internacionales que se dedican al diseño de experimentos que tiendan a minimizar las dificultades enumeradas más arriba para así poder realizar los dos tipos de experimentos sobre el mismo caso y perfeccionar las técnicas experimentales.

En forma general el experimento numérico se puede plantear como sigue: dado un entorno físico (reactor) y un flujo de especies químicas que pueden reaccionar químicamente entre sí, se plantean las relaciones matemáticas entre las variables del flujo, como ser,

- Leyes de conservación de la física (de la masa, de la cantidad de movimiento y de la energía)
- Leyes de la cinética química, la termodinámica y la termoquímica.
- Otras relaciones tales como relaciones de simetría, leyes de la mecánica, etc.
- Condiciones de borde o frontera.

Algunas de estas relaciones tienen forma algebraica (por ejemplo, la ecuación de estado de los gases ideales), pero otras tienen forma de ecuaciones diferenciales, es decir, plantean relaciones entre las derivadas, y no entre los valores, de las variables, y por consiguiente no tienen en general una solución explícita; para ellas se busca una solución numérica que las satisfaga, sujeta a las condiciones de borde. Para esto se procede a discretizar (dividir) el campo de flujo en porciones finitas y replantear las ecuaciones diferenciales en cada porción, en forma discreta, convirtiéndolas en ecuaciones algebraicas lineales, tantas como porciones haya del campo de flujo. El sistema de ecuaciones lineales resultante se resuelve conjuntamente con las relaciones algebraicas remanentes para obtener, en cada porción del espacio discretizado, un conjunto de los valores de todos los parámetros del flujo, que forman la "solución" numérica del problema.

Un concepto muy útil para el modelado de flujos reactivos es el de escalares conservados. Un escalar conservado es aquel que no se modifica por las reacciones químicas. Ejemplos de escalares conservados son los números de átomos de las especies atómicas; en un sistema adiabático la entalpía total estandarizada es también un escalar conservado.

Para la reacción $A+B \rightarrow \text{Productos}$, definimos la fracción de mezcla como

$$f = \frac{\text{masa de la especie } A}{\text{masa total}}.$$

La cantidad de masa que aportó a la mezcla la especie A no se puede alterar, haya o no sucedido la reacción química; luego, la fracción de mezcla es un escalar conservado.

El escalar puede normalizarse; si β es un escalar conservado que toma los valores β_A y β_B en las corrientes de reactantes de entrada A y B, entonces se puede escribir

$$f = \frac{\beta - \beta_B}{\beta_A - \beta_B}.$$

Cualquier otro escalar conservado puede deducirse de éste por medio de relaciones lineales con coeficientes constantes.

La combustión del gas natural en aire es usualmente turbulenta, lo que requeriría resolver las ecuaciones en su valor instantáneo para muchos pasos de tiempo. Como la escala de turbulencia es usualmente muy pequeña se requeriría un elevado número de puntos de cálculo. Estas condiciones implican un elevadísimo número de ecuaciones lineales, tal que está fuera del alcance de las herramientas computacionales disponibles.

Por otro lado el conocimiento instantáneo de las variables es de poca utilidad para el diseño de sistemas de combustión; es más útil el conocimiento de los valores promedio en el tiempo y/o el espacio. Por lo tanto se plantean las ecuaciones promediadas. Dados los grandes cambios de densidad que se encuentran en la combustión se utiliza el promedio tipo Favre, o pesado con la densidad. Resultan así, por ejemplo:

Ecuaciones de Navier-Stokes:
$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}D_u\tilde{S}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{p} + \frac{2}{3}\bar{\rho}\tilde{\kappa}\right)$$

Ecuación de conservación de la masa:
$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0$$

Ecuación de transporte de la fracción de mezcla:
$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_f\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j}\right)$$

Ecuación de transporte de una especie química:

$$\frac{\partial(\rho\Gamma_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j\Gamma_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_{i,\phi}\frac{\partial\Gamma_i}{\partial x_j}\right) + w_i$$

El modelado del escurrimiento turbulento se puede realizar de varias maneras, pero el método más usual es el de modelado de dos escalares, la energía cinética de la turbulencia, formando el llamado método κ - ϵ .

La fracción de mezcla también tendrá variaciones estocásticas, y se plantea una ecuación de transporte de la varianza de la misma:

$$\bar{\rho}\tilde{u}_j\frac{\partial\tilde{g}}{\partial x_j} = -2\overline{\rho u_j'' f''}\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho u_j'' f''^2}\right) - 2\rho D\left(\frac{\partial f''}{\partial x_j}\right)^2$$

Se define así la disipación del escalar $\chi = 2D\frac{\partial f''}{\partial x_j}\frac{\partial f''}{\partial x_j}$ cuyo valor promedio se

modela como $\tilde{\chi} \approx 2\tilde{g}\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{\kappa}}$

Este es el método denominado RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes).

Este método, aunque relativamente sencillo de aplicar, no refleja adecuadamente la interacción entre las variaciones de composición de la mezcla y las propiedades del flujo. Bilger y Klimenko (independiente y simultáneamente) han desarrollado el método CMC (Conditional Model Closure [1][2]) que consiste fundamentalmente en considerar a la fracción de mezcla como una variable independiente (identificada con la letra griega η para diferenciarla del valor promedio f) y resolver el sistema de ecuaciones de las especies químicas no sólo en el espacio sino también para todos los posibles valores de la fracción de mezcla. Obtenidas las composiciones de la mezcla para cada valor de η el valor promedio de cada especie química se obtiene promediando (integrando) con la función de distribución de probabilidades de η , de la que ya se conocen su media y varianza (son las obtenidas para la fracción de mezcla),

$$\tilde{Q} = \int_0^1 Q(\eta) \tilde{P}(\eta) d\eta, \text{ etc.}$$

La ecuación de transporte de una especie química Q_i considerando la cuarta variable independiente (ecuación CMC) es:

$$\langle \vec{V} | \eta \rangle \bullet \nabla Q_i - \sigma \left\{ \nabla \left[\log(\langle \rho | \eta \rangle p(\eta)) \right] * \nabla Q_i \right\} - \nabla (\sigma \nabla Q_i) = \frac{1}{2} \chi_\eta \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle \varpi | \eta \rangle$$

De lo anterior se desprende que es necesario conocer dos funciones de η , las distribuciones de probabilidades (PDF) y de disipación del escalar χ_η (Conditional Scalar Dissipation, CSD).

Tradicionalmente se han utilizado para esto la función Beta y una Función Error [3]. Sin embargo, Mortensen [4] [5] ha demostrado que estos modelos no son consistentes con la ecuación de CMC, y ha dado los algoritmos para encontrar las formas correctas de estas distribuciones estocásticas, tanto para el caso de mezcla de dos corrientes como para tres. Esto lo ha logrado mediante la aplicación del método de funciones de mapeo presuntas (Presumed Mapping Functions, PMF).

El procedimiento de Mortensen implica resolver algunas ecuaciones integrales de funciones error inversas, y es bastante complejo, por lo que no había sido puesto en práctica hasta recientemente. Esto fue hecho y los resultados presentados en un trabajo ya aprobado para su publicación internacional, donde se prueba la utilización de estos nuevos algoritmos y se los compara favorablemente con los modelos anteriores (funciones Beta y Error). En lo que sigue se presenta una versión abreviada de este trabajo.

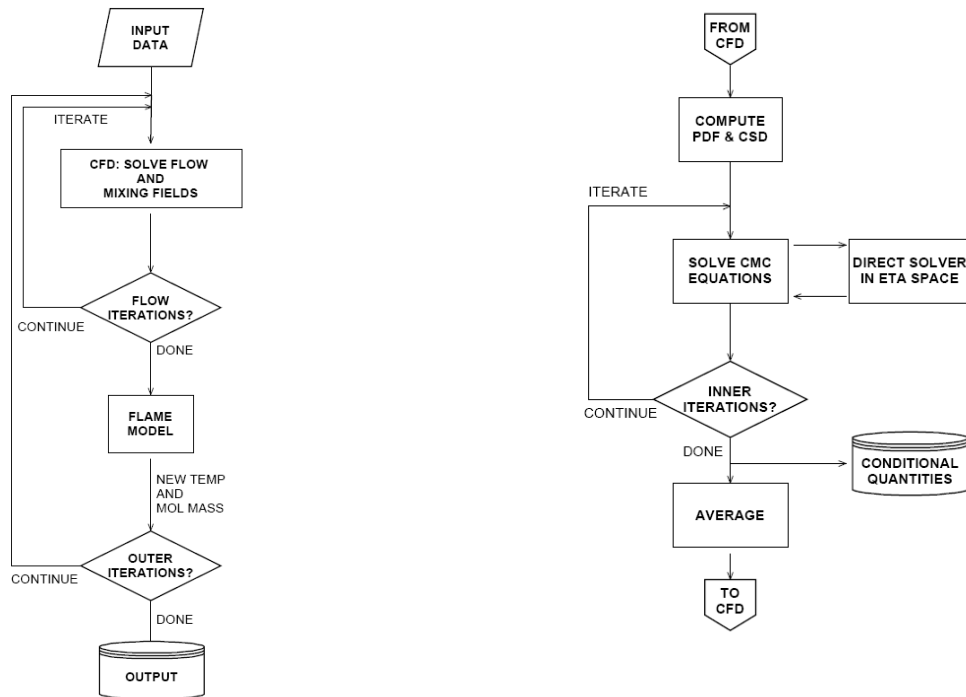
Parte Experimental

Para probar el nuevo método se eligió el caso de la llama estándar tipo D [6], que se muestra en la figura:



Se trata de una llama de difusión turbulenta de metano en aire rodeada de un anillo piloto, por lo que es un caso de mezcla de tres corrientes. Todos los parámetros de esta llama han sido medidos físicamente por un número de laboratorios en varias partes del mundo, por lo que se conocen los valores experimentales con gran detalle [7][8][9][10].

Para la resolución del campo de flujo (Ecuaciones de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento, de la turbulencia y de la mezcla promedio) se utilizó un código existente de fluidodinámica computacional (CFD). El modelo de llama es el CMC con el agregado de las funciones de Mortensen para las distribuciones de PDF y CSD. Se siguen los siguientes esquemas:

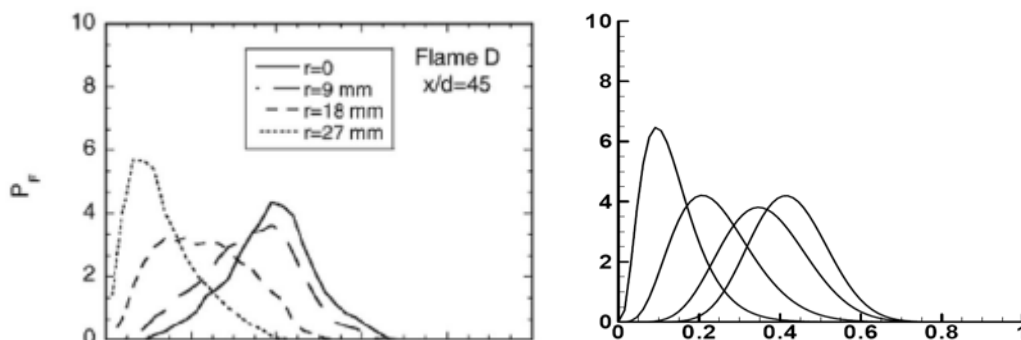


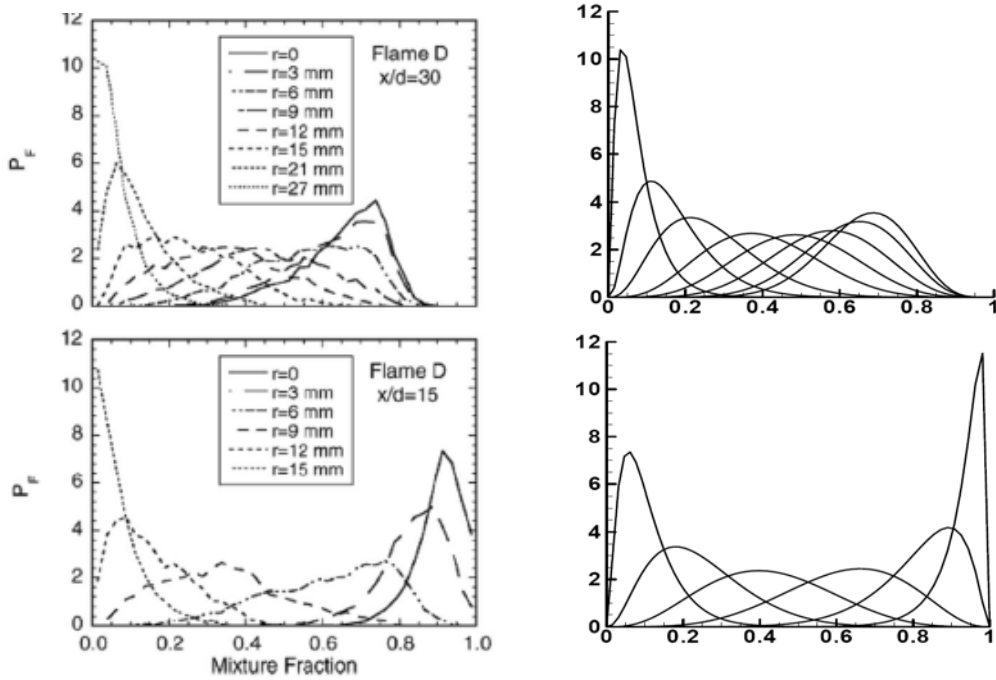
La química se modeló con el sistema de reacciones de Smooke [11] y los términos de fuente se computaron con el código CHEMKIN [12].

El cómputo se realizó en una PC con un procesador dual-core de 3GHz con 2GB de RAM. Tanto el código CFD como el CMC iteraron en aproximadamente 75 microsegundos de tiempo en pantalla, por celda y por iteración. Se estima que, si se comienza de condiciones iniciales se necesitarían unos 15 días de corrida.

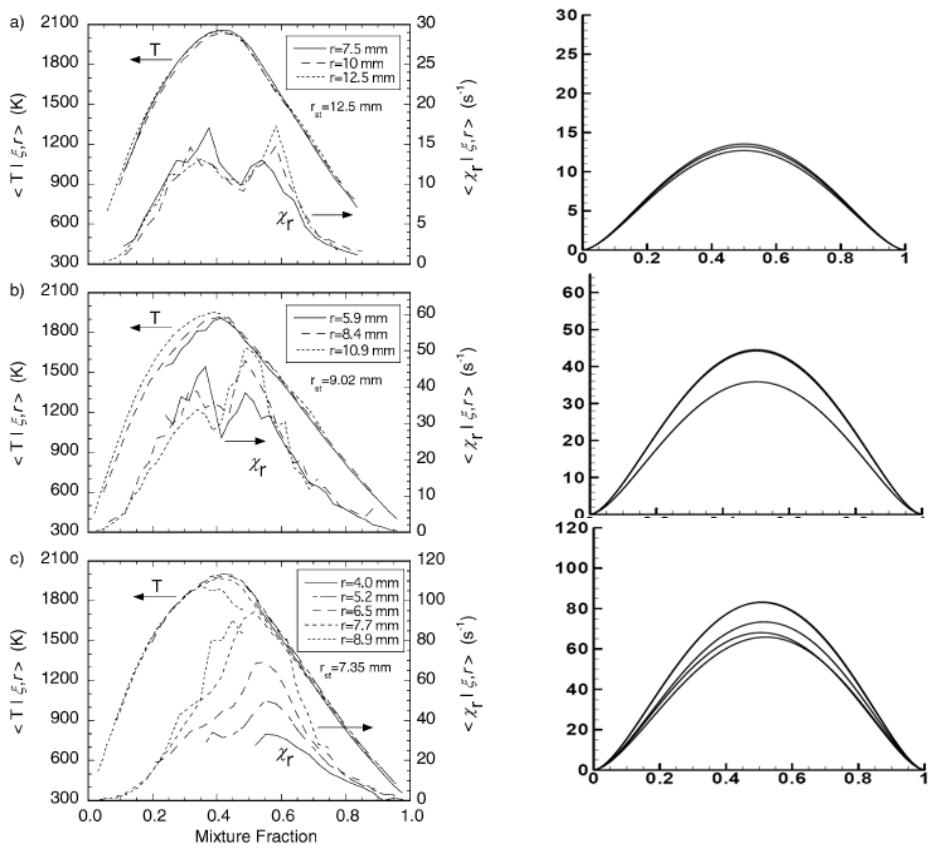
Resultados y Discusión

La figura siguiente muestra distribuciones de probabilidad según el método PMF comparadas con resultados experimentales a 15, 30 y 45 diámetros .

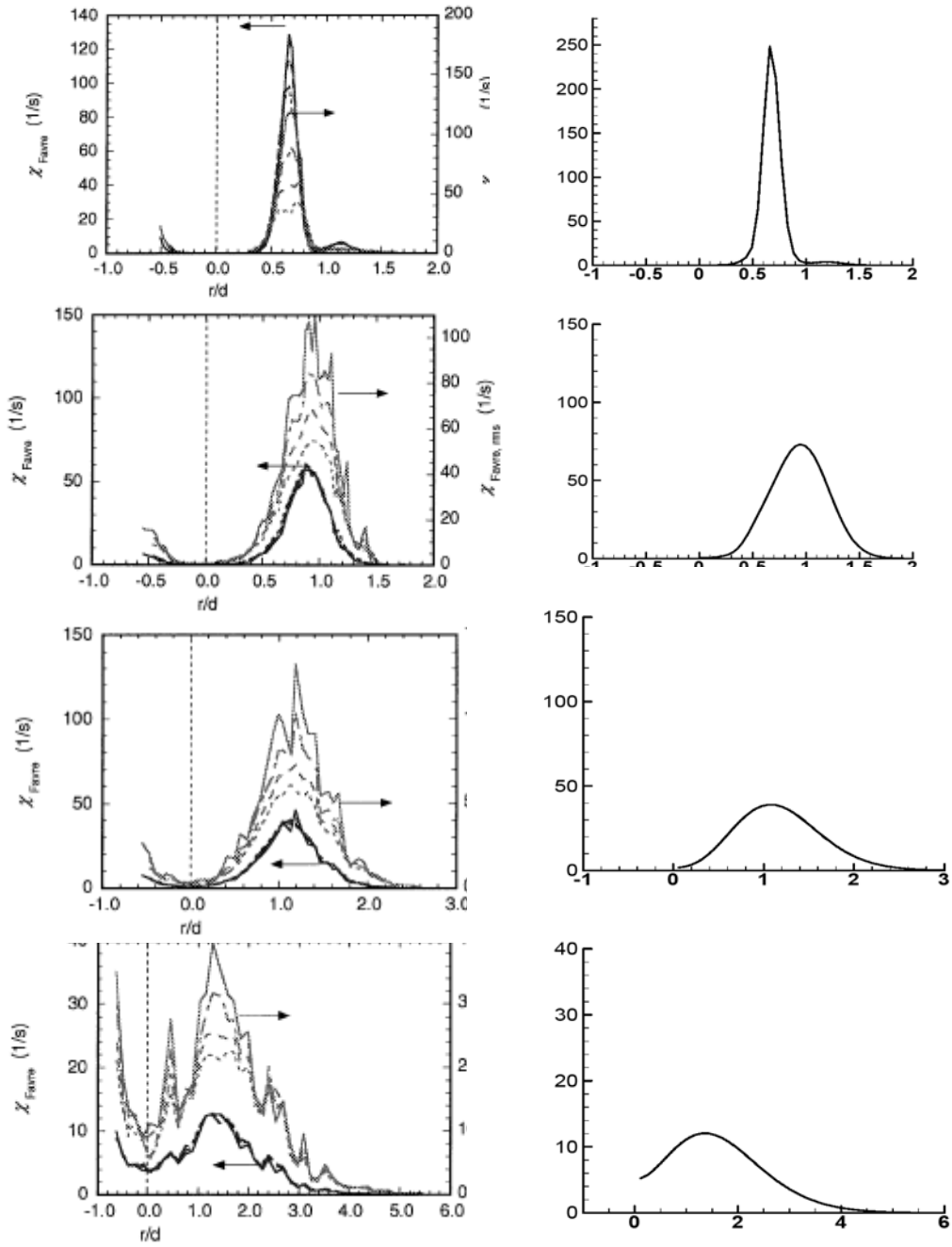




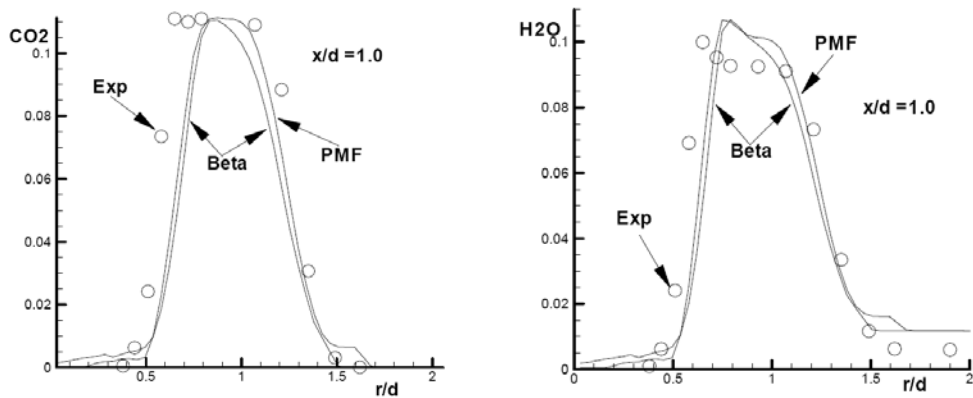
La figura siguiente muestra las distribuciones obtenidas con el método PMF para la disipación condicional del escalar comparadas con los resultados experimentales a 30, 15 y 7.5 diámetros:

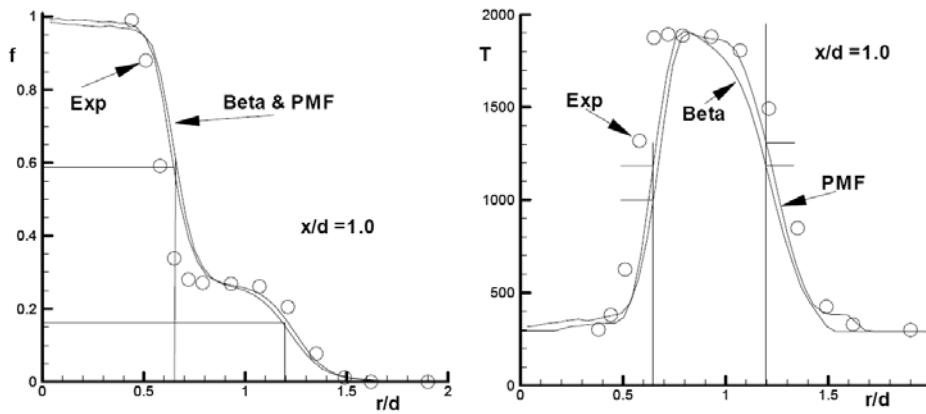


La figura siguiente muestra perfiles radiales de la disipación del escalar media (modelada) comparada con resultados experimentales a 2, 7.5, 15 y 30 diámetros:



Las figuras siguientes muestran algunas distribuciones en dirección radial a una distancia axial de un diámetro del jet central, es decir, cerca de las entradas, donde las mejoras debidas al nuevo método deberían ser más evidentes.

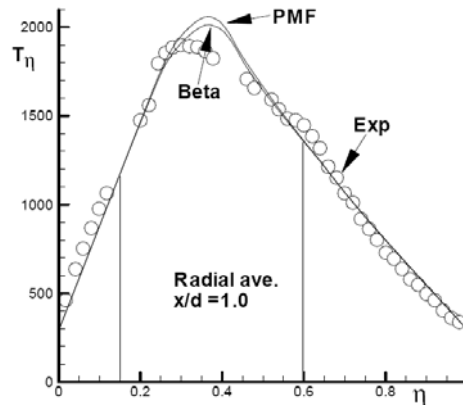




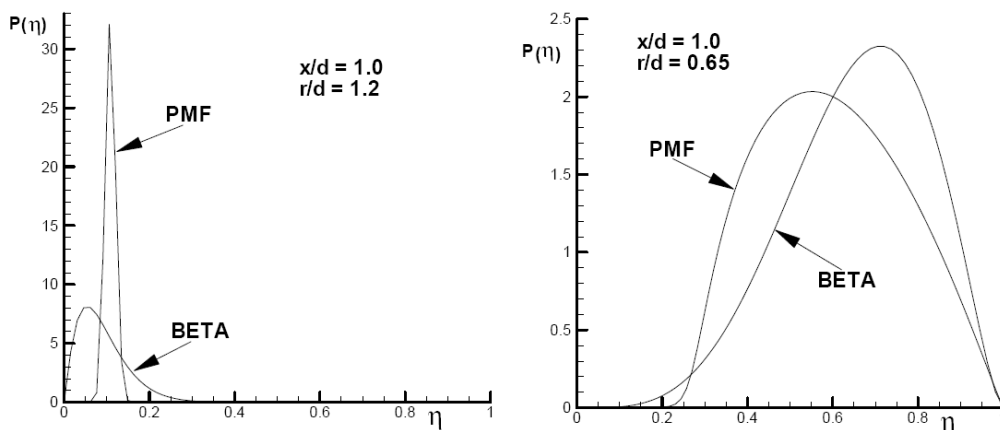
Estos resultados muestran una mejora en las predicciones utilizando el modelo PMF. Se hace hincapié en que la única diferencia entre los dos resultados computacionales es en los modelos de distribuciones de PDF y CSD.

Se nota que la temperatura está más cerca del valor experimental por entre 100 y 200 K en los puntos $r/d=0.65$ y $r/d=1.2$. La fracción de mezcla media en estos puntos es aproximadamente 0.6 y 0.15, vale decir, en las zonas de mezcla entre el chorro central y el piloto y entre el piloto y el aire circundante.

La figura siguiente muestra la temperatura condicional en la misma posición, promediada radialmente. Se nota que ambos modelos predicen bastante bien la temperatura excepto por la región cerca del punto estequiométrico; esto puede atribuirse a la falta de un modelo de radiación.



Dada la similitud entre los promedios condicionales para fracciones de mezcla de 0.6 y 0.15 ($r/d=0.65$ y 1.2), las mejoras observadas deben deberse al promediado. Las figuras siguientes muestran las PDF correspondientes a estos dos puntos.



La figura de la izquierda, de la región pobre en combustible, muestra que la función Beta promediará las variables condicionales sobre un rango más amplio de la fracción de mezcla, incluyendo más porciones del lado del aire. A la derecha, la función Beta pondrá más peso en el lado rico en combustible. En ambos casos la temperatura promediada será más baja con la función Beta, como se observó.

Conclusiones y Bibliografía.

Los modelos de funciones estocásticas basados en funciones de mapeo presuntas (PMF) han sido exitosamente aplicados al modelado de la llama D, utilizando el método de cierre por momentos condicionales (CMC), obteniéndose mejoras en los resultados cuando se los compara con las funciones estocásticas tradicionales.

El caso experimental de la llama D, aunque trimodal, no presenta recirculaciones ni engolfamientos. La aplicación de los modelos PMF a experimentos más exigentes y con modelos más complejos de química y turbulencia está aún por demostrar.

Bibliografía:

- [1] Klimenko, A.Yu., *Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow*, Fluid Dynamics, 25 (1990), pp.327-334.
- [2] Bilger, R.W., *Conditional Moment Closure for Turbulent Reacting Flow*, Phys Fluids A, 5 (2), (1993), pp. 436-444.
- [3] Peters, N.; *Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion*, Prog. Energy Combust. Sci. 10, pp. 319-339
- [4] Mortensen, M.; *Mathematical modeling of turbulent reactive flows*, PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Dept. of Chemical Engineering and Environmental Sciences, Sweden, 2005
- [5] Mortensen, M., and Andersson, B.; *Presumed Mapping Functions for Eulerian Modeling of Turbulent Mixing*, Flow, Turbulence and Combustion 2006, 76, pp. 199-219.
- [6] Disponible en: <http://www.ca.sandia.gov/TNF/>.
- [7] Barlow, R. S.; Frank, A. N.; Karpetis, A. N., and Chen, J.-Y.; *Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure*, Comb. and Flame 143 (2005), pp. 433-449
- [8] Barlow, R. S.; Frank, A. N.; Karpetis, A. N.; *Measurements of Scalar Variance, Scalar Dissipation, and Length Scales in Turbulent Piloted Methane/Air Jet Flames*, Flow, Turbulence and Combustion 72 (2004), pp. 427-448.
- [9] Karpetis, A. N., and Barlow, R. S.; *Measurements of flame orientation and scalar dissipation in turbulent partially premixed methane flames*, Proc. Comb. Inst. 30 (2004), pp. 663-670
- [10] Pitsch, H, and Steiner, H.; *Scalar mixing and dissipation rate in large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion*, Proc. Comb. Inst. 28 (2000), pp. 21-49.
- [11] Smooke, M. D., and Giovangigli, V.; *Formulation of premixed and nonpremixed test problems*", Capítulo I de Lecture Notes in Physics 384, M.D. Smooke, ed., Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [12] Gordon, S., and McBride, B.J.; *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Jouguet detonations*, NASA SP-273, 1976.