UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INDUSTRIAS
VALPARAÍSOVALPARAÍSO - CHILE

IMPLEMENTACIÓN DE VARIABLE DE PROGRESO EN LA SIMULACIÓN DE LLAMAS DE DIFUSIÓN LAMINAR DE ETILENO VÍA FLAMELET

GONZALO FRANCISCO VALDIVIA GAJARDO

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL INDUSTRIAL

PROFESOR GUÍA	:	DR. RODRIGO DEMARCO BULL
PROFESOR CORREFERENTE	:	DR. ANDRÉS FUENTES CASTILLO

NOVIEMBRE 2017

TÍTULO DE MEMORIA:

IMPLEMENTACIÓN DE VARIABLE DE PROGRESO EN LA SIMULACIÓN DE LLAMAS DE DIFUSIÓN LAMINAR DE ETILENO VÍA FLAMELET

AUTOR:

GONZALO FRANCISCO VALDIVIA GAJARDO

TRABAJO DE MEMORIA, presentado en cumplimiento de los requisitos para el grado de Ingeniería Civil Industrial de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Dr. Rodrigo Demarco Bull .....

Dr. Andrés Fuentes Castillo .....

Valparaíso, Chile. Noviembre de 2017

AGRADECIMIENTOS

A mi profesor guía, Rodrigo Demarco, quien siempre con una enorme humildad e inteligencia cooperó en cada etapa de esta tesis. Al profesor Andrés Fuentes por participar desinteresadamente en dudas que surgían de la elaboración del trabajo correspondiente. Y a ambos, junto a Gonzalo Olivares y Jorge Contreras, por aportar de muchísimas otras formas en mi desarrollo profesional y personal, con buenos consejos, conversaciones, análisis de situaciones y chistes, entre otras. Son considerados amigos.

Este trabajo va para mi familia, lo que incluye no solo los integrantes de mi hogar, sino que a mis tíos, primos y abuelos. Dedicado a mis buenos amigos y compañeros(as) que, incluso sin estar con ellos muchas veces, son bien considerados. No los nombro, porque son bastantes y temo dejar a uno de lado sin intención.

Finalmente, a mi Universidad.

RESUMEN EJECUTIVO

Una llama laminar de difusión en una configuración de coflujo es simulada utilizando dos modelos de flamelet distintos, con el fin de comparar el rendimiento de ambas formulaciones. Las librerías de flamelet pretabuladas son generadas en ambos casos a partir de las mismas estructuras laminares, correspondientes a llamas a contraflujo unidimensionales, alimentadas con etileno puro y aire con concentración de oxígeno de 21 %, cambiando únicamente los parámetros característicos utilizados para la tabulación: en uno de los modelos se utilizan la fracción de mezcla, defecto de entalpía y la tasa de disipación escalar, mientras que en el otro se adoptan la fracción de mezcla, defecto de entalpía y una variable de progreso definida como la suma de las fracciones de masa de las especies mayores, H_2O y CO_2.

Los resultados de las simulaciones obtenidos para la llama de coflujo son comparados con resultados experimentales disponibles en la literatura [1], mostrando una predicción de temperatura similar para ambas formulaciones. Sin embargo, una diferencia apreciable existe respecto a las especies menores y la incidencia en la formación de hollín. En particular, existe una gran diferencia para el monóxido de carbono y para el benceno, las cuales tienen un efecto en las predicciones de la producción de hollín de estas llamas, afectando a su vez la cantidad de energía que esta emite por radiación.

Estos resultados muestran las ventajas de la utilización de la variable de progreso en vez de la tasa de disipación escalar, lo cual ya ha sido confirmado en el contexto de llamas turbulentas en fase gaseosa [2] y en *spray* [3].

Palabras Claves Variable de progreso; Llamas de difusión laminar; Producción de hollín.

ABSTRACT

A diffusion laminar flame in a coflow configuration is simulated using two different flamelet models, in order to compare the performance of both formulations. The flamelet libraries are generated in both cases from the same laminar structures, corresponding to unidimensional flames fed with pure ethylene and air with oxygen concentration of 21 %, changing only the characteristic parameters used for the tabulation: in one of the models the mixture fraction, enthalpy defect and the scalar dissipation rate are used, while in the other model the mixture fraction, enthalpy defect and a progress variable defined as the sum of the fractions of mass of the major species, H_2O and CO_2, are adopted.

The results of the simulations obtained for the coflow flame are compared with experimental results available in the literature [1], showing a similar temperature prediction for both formulations. However, an appreciable difference exists with respect to the minors species and the incidence of soot formation. In particular, there is a large difference for carbon monoxide and benzene, which have an effect on the soot production predictions of these flames, in turn affecting the amount of energy emitted by radiation.

These results show the advantages of the use of the progress variable instead of the scalar dissipation rate, which has already been confirmed in the context of turbulent flames in gas phase [2] and spray [3].

Keywords Progress variable; Laminar diffusion flames; Soot production.

Índice de Contenidos

1. Problema de Investigación **1**
1.1. Introducción . . . 1
1.2. Motivación . . . 3
1.3. Alcance . . . 4
1.4. Objetivos . . . 5
1.4.1. Objetivo General . . . 5
1.4.2. Objetivos Específicos . . . 5

2. Marco Teórico **7**
2.1. Antecedentes . . . 7
2.1.1. Problemas Asociados a la Combustión . . . 8
2.2. Matriz Energética de Chile . . . 9
2.3. Combustión . . . 10
2.4. Hollín . . . 12
2.4.1. Características . . . 12
2.4.2. Mecanismos de Formación . . . 13
2.5. Llamas de Difusión . . . 15
2.6. Concepto de Flamelet . . . 16
2.6.1. E-EDFM: Extended Enthalpy Defect Flamelet Model . . . 17
2.6.1.1. Fracción de Mezcla . . . 18
2.6.1.2. Tasa de Disipación Escalar . . . 18
2.6.1.3. Defecto de Entalpía . . . 19
2.7. Variable de Progreso . . . 19
2.8. Índice de Oxígeno . . . 20

3. Metodología de Trabajo **23**
3.1. Ecuaciones Gobernantes . . . 24
3.2. Generación de Base Flamelet . . . 27
3.2.1. Perfiles de Flamelet para Condiciones Adiabáticas . . . 27
3.2.2. Perfiles de Flamelet para Condiciones No-Adiabáticas . . . 30
3.3. Simulación en CFD . . . 34
3.3.1. Quemador y Condiciones de Entrada . . . 34
3.3.2. Método de Consulta . . . 35

4. Estado del Arte **39**
4.1. Pierce & Moin 2004 . . . 39
4.2. Hu, Olguín & Gutheil 2017 . . . 42

5. Análisis de Resultados **45**
5.1. Campos de la Llama . . . 45
5.1.1. Estructura de Llama . . . 45
5.1.2. Producción de Especies . . . 48

5.1.3. Interpolación 50

6. Conclusiones y Perspectivas **51**

Bibliografía **53**

Índice de Figuras

2.1. Matriz energética chilena. Fuente: [4]. 9
2.2. Principales reacciones que se dan en la pirólisis. Fuente: [5]. 11
2.3. Muestreo Termoforético (TS). Fuente: [6]. 13
2.4. Formación de partículas en llamas. Fuente: [7]. 14
2.5. Tiempos característicos de procesos físicos y químicos. Fuente: [8]. 15
2.6. Representación esquemática de un quemador Gülder. Fuente: [9]. 16

3.1. Esquema del método numérico empleado. Fuente: Elaboración propia. 23
3.2. Geometría de la llama de difusión de flujo opuesto axisimétrica. La línea segmentada representa la línea de estancamiento; la región sombreada indica la llama. Fuente: [10]. 25
3.3. Perfiles de temperatura en condiciones adiabáticas respecto al eje axial. Fuente: Elaboración propia. 30
3.4. Perfiles para χ en condiciones adiabáticas con OI 21 % respecto a Z. Fuente: Elaboración propia. 31
3.5. Perfiles de defecto de entalpía de flamelet para $\alpha = 0.5$ con OI 21 %. Fuente: Elaboración propia. 32
3.6. Relación de temperatura y variable de progreso para α =0.5 s^{-1} (curva roja) y α =900 s^{-1} (curva verde) en condiciones adiabáticas. Fuente: Elaboración propia. 33
3.7. Variable de progreso con su tasa de reacción en $mol/cm^3/s$ y fracciones en masa de las especies que la conforman en el espacio de Z para un α=440 s^{-1}. Fuente: Elaboración propia. 33
3.8. Esquema del dominio de una llama co-flujo axisimétrica. Fuente: Elaboración propia. 34
3.9. Parámetros a interpolar en dos dimensiones. Fuente: Elaboración propia. 36

4.1. Contraste de la tasa de disipación escalar y la temperatura. Fuente: [2]. 40
4.2. Captura de fracción de mezcla para: (a) SFM; (b) Modelo con variable de progreso. Fuente: [2]. 41
4.3. Captura de fracción de masa producido (Y_{PV}) para: (a) SFM; (b) modelo con variable de progreso. Fuente: [2]. 42
4.4. Planos de contorno de: (a) fracción de masa de CO_2; (b) fracción de masa de CO; (c) término fuente de reacción química de la variable de progreso en dependencia de la fracción de mezcla y la variable de progreso. Fuente: [3]. 43

5.1. Campos de temperatura de la llama para los modelos estudiados. Fuente: Elaboración propia. 46
5.2. Fracción de hidroxilo producido. Fuente: Elaboración propia. 46
5.3. Campos asociados a radiación y liberación de energía. Fuente: Elaboración propia. 47
5.4. Fracciones en masa de variable de progreso producidas. Fuente: Elaboración propia. 48
5.5. Fracciones en masa de CO, C_2H_2 y C_6H_6. Fuente: Elaboración propia. 49

1 | Problema de Investigación

1.1. Introducción

Cerca de 8 millones de toneladas de hollín son producidos cada año por la quema de todo tipo de agente, desde el carbón utilizado en plantas eléctricas hasta la quema de aceite utilizado en calderas de barcos y transporte naviero en general. Este hecho tiene una implicancia negativa sobre el planeta: el hollín está afectando el clima, duplicando casi el calentamiento estimado por los científicos hasta hace unos años [11]; por primera vez se apunta a las fuentes de hollín como emisores contaminantes que requieren nuevas medidas regulatorias.

En efecto, los vientos dominantes arrastran los agentes contaminantes hacia el Ártico (análogo a lo que ocurre en el Sur terrestre), donde circulan en una espesa niebla hasta que las tormentas los empujan al suelo. Estas partículas calientan la atmósfera cuando están suspendidas en el aire. Al posarse sobre la nieve, aceleran el derretimiento, quedando expuesta la superficie subyacente de la tierra, absorbiendo aún más cantidad de energía solar, lo que incrementa temperatura de la región; fenómeno que acelera el conocido efecto invernadero [12].

Consideremos, por ejemplo, que en un motor diésel el hollín nace por una combustión incompleta, y si bien la mayoría de los productos salen a través del sistema de escape del motor, un porcentaje menor es absorbido por el lubricante de éste, en donde el hollín acumulado actúa como un componente abrasivo, y su presencia entre dos superficies deslizantes puede provocar un desgaste notable. Green y Lewis [13] plantean que, añadido a lo anterior, una alta concentración de hollín puede aumentar la acidez local y, alrededor de los pistones, donde la alta temperatura y gases volátiles coexisten, también se puede producir corrosión.

El hollín es un participante importante en la transferencia de calor por radiación en sistemas de combustión. El carbono negro es la fracción del hollín con menor tamaño particulado, i.e. el más complicado. Por tanto, el interés en la medición de las emisiones de hollín está dado por la producción de éste en las llamas, que permite controlar los elementos básicos de hidrocarburos de combustión [15]. Frank et al. [14] indican que recientemente se ha puesto énfasis en la caracterización de la toxicidad, distribución del tamaño

de partículas, y la fracción de superficie de hollín emitido por los nuevos dispositivos de combustión.

Considerando que las llamas industriales son en mayor medida turbulentas, se ha intentado investigar el proceso de interacción entre la química y la turbulencia a nivel numérico. Sin embargo, no se ha logrado mejorar del todo la relación entre la química y los procesos detallados asociados a la producción de hollín, incluso en llamas laminares, siendo uno de los modelos más efectivos en esta materia el concepto de flamelet. Este concepto considera que es posible conocer el comportamiento de llamas a partir del estudio de una llama más simple. Esta hipótesis se sustenta en las similitudes existentes entre los procesos en fase gaseosa de llamas laminares y turbulentas [16].

Una llama de difusión nace a partir de la disposición controlada de un combustible y aire, suministrados separadamente a través de dos tubos concéntricos. El combustible se inyecta por el tubo interno y el aire (comburente) a través del tubo externo, el cual experimentalmente se examina a través de un sistema láser computacional; un sistema descrito por Caetano et al. [17]. Al momento de reaccionar ambos agentes, se libera hollín como resultado de la reacción de combustión, junto a otros gases residuales. Cabe destacar que una llama de difusión tiende a quemar más lento y producir más hollín que las llamas de premezcla, ya que presenta una combustión más incompleta a falta de oxidante [18].

Bajo el concepto de flamelet, una llama de contraflujo normalizada por la fracción de mezcla es utilizada para generar una tabulación de tres diferentes variables que explican la combustión a modo puntual. Se trata de un sistema de química rápida, en donde ecuaciones gobernantes de la combustión son utilizadas para generar perfiles de llamas. La temperatura de la reacción es utilizada para describir la actividad de la llama de difusión, la cual es normalizada a través de la fracción de mezcla de combustible/oxidante. Posteriormente, se añade un escalar de transporte y uno de radiación liberada. Estos escalares conforman una matriz tridimensional. Un simulador recoge estos datos y calcula una llama definida por el usuario, la cual interpola variables requeridas para lograr describir la combustión.

Modelos de seguimiento en la producción de hollín se establecen a este nivel de simulación, puesto que la matriz tridimensional (librería flamelet) no resulta ser una buena caja de información a lo que respecta el hollín. La escala de tiempo de la química en este nivel es tan pequeña, que el proceso descrito queda muy limitado, y no permite contemplar procesos lentos de formación del hollín.

Uno de los parámetros que puede afectar directamente al proceso de producción de hollín y su radiación, es la concentración de oxígeno en el flujo oxidante. Esta cantidad, denominada Índice de Oxígeno (OI), afecta la intensidad de la reacción de combustión, su temperatura, y otros procesos asociados al progreso de la partícula de hollín. A medida que se aumenta la cantidad de oxígeno, se intensifica la reacción de formación del hollín, produciendo más hollín que en condiciones normales (OI 21 %), no obstante, intensifica la reacción de oxidación de la partícula de hollín en sus últimas fases, quemándola [19].

Para aplicar estos modelos, es necesario desarrollar mejoras a la base química que describe la

combustión en simulación. Para aportar en este campo, se establece la variable de progreso que sigue el proceso de la combustión según la formación de las especies mayores: agua y dióxido de carbono. Este enfoque intenta dar una relación independiente de la fracción de mezcla, que en el método tradicional explica a las demás variables comprendidas en la biblioteca utilizada para simular.

En este trabajo se simula una llama de difusión de etileno con flujo de oxidante de OI 21 % aplicando una variable de progreso que reemplaza una tasa de disipación que no ha sido capaz de predecir correctamente el proceso de producción de hollín [2]. Esta variable corresponde a la suma de fracciones de masa de dos de los principales productos de la combustión: CO_2 y H_2O. Así, se estudia la predicción de esta variable para con el hollín y se compara con los resultados disponibles en la literatura [1].

La formación de hollín viene dada por la formación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH) [20], y al ser un problema semi-empírico, el fenómeno recoge parámetros de entrada aportados por el investigador. En resumen, el método de tabular la información implica que se obvia el proceso químico base para el fenómeno de combustión. Entonces, una variable de progreso permite representar la actividad de formación de especies químicas principales del hollín. Finalmente, la filosofía subyacente de los modelos químicos desarrollados en este trabajo es que la descripción más eficaz de la combustión describirá los detalles de los procesos de difusión-reacción multicomponente a un conjunto mínimo de escalares de seguimiento transportados.

1.2. Motivación

La combustión es el principal proceso generador de energía, en el cual se presentan una serie de fenómenos físicos de gran interés para las ciencias tales como la termodinámica, la química y la física. De esta forma, y al ser un proceso tan completo, hace que el estudio sea muchas veces difícil y lento, pero a su vez fascinante para la comunidad científica e industrial. Hornos y calderas funcionan con la combustión de los combustibles fósiles al igual que los motores de los automóviles. Ésto hace que este proceso sea tan importante para la comunidad, dado que tanto las instalaciones industriales como las domésticas utilizan combustores, generando una mayor expectación ante estudios en investigaciones que ayuden a comprender el proceso de mejor manera.

Con lo anterior, es preocupación la emanación de contaminantes en el proceso de combustión. Las llamas liberan CO_2 y partículas de hollín como principales precursores de la contaminación. El dióxido de carbono es el principal responsable del calentamiento global, mientras que el hollín es otro protagonista en este fenómeno. Para generar una combustión más enérgica es importante que exista una gran liberación del CO_2 (en desmedro de CO), sin embargo, el hollín es responsable de contaminación y pérdida de eficiencia en la combustión al calentar estas partículas de carbono. Pero a la vez, una partícula de hollín oxidada también entregará una cantidad de calor importante. Controlar esta entrega es sumamente complicado.

Este trabajo entrega una amplitud en el modelo de llama a través de un conjunto de múltiples variables que se relacionan para seguir de mejor manera el progreso de la combustión. De lograrlo, modelos numéricos asociados a la predicción del hollín se ven favorecidos. Este conocimiento agregado permite a los investigadores extender la conceptualización de una llama y lograr realizar una mejor lectura a partir de los gases emanados y energía entregada por ella.

1.3. Alcance

El presente estudio plantea una variable de progreso para el cálculo de hollín en una llama laminar simulada vía flamelet. En ella, se emplea combustible y comburente de tal manera que la reacción tiene lugar en la boquilla del quemador. Para ello, se estudia la investigación realizada por Carbonell et al. [21], el cual analiza el concepto de pérdida radiativa, tal que compara cálculos numéricos detallados basados en la solución de las ecuaciones de transporte con los cálculos de flamelet. A su vez, para aplicar la variable de progreso, incorporamos el estudio y análisis de investigación de Hu et al. [3], quienes intentan aplicar una variable de progreso homóloga para analizar cómo se comporta en función de otras variables, distribuciones y parámetros que participan en la combustión turbulenta del *spray*.

A grandes rasgos, el conjunto de actividades, considerando una profunda investigación de los teoremas y modelos que acompañan las estructuras de datos, contempló el afinamiento en las librerías existentes de etileno para la proporción del 21 % de oxígeno en el flujo oxidante.

El desarrollo de este trabajo se basa en el código OPPDIF, la herramienta de simulación de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) y extensiones aplicadas por investigadores del grupo colaborativo Energy Conversion & Combustion Grou

Por último, se indica que este trabajo se enmarca dentro del trabajo de graduación para la obtención del título de Ingeniero Civil Industrial de la Universidad Técnica Federico Santa María.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo General

Implementar una variable de control generada, mediante el concepto de flamelet, en la simulación de llamas de difusión laminar de etileno para medir el progreso de la combustión.

1.4.2. Objetivos Específicos

Los objetivos específicos comprenden un conjunto de actividades y puntos que conforman el modelo numérico que fue implementado junto con su respectivo análisis para obtener los resultados esperados. Esto permitirá que investigadores puedan tomar el presente trabajo y generar continuidad.

1. Estudiar un modelo matemático que formule el cálculo de las concentraciones de hollín a través de la implementación de una variable de control bajo el concepto de flamelet.
2. Formular un código de programación unidimensional que describa una llama coflujo mediante la interpolación en una librería tridimensional flamelet, y que entregue el cálculo parametrizado de especies relevantes para el hollín, junto a otras variables de interés.
3. Medir la energía liberada y la producción de especies relevantes de la combustión generada por una llama simulada vía flamelet.
4. Evaluar la aplicación de la variable de progreso para seguir el proceso de combustión en una llama de etileno con índice de oxígeno 21 %.

2 | Marco Teórico

Este capítulo describe la teoría necesaria para comprender a cabalidad la investigación que se llevó a cabo. Se intenta relacionar el carácter científico con la relevancia que tiene para la sociedad industrial e investigativa tener conocimientos más extensos sobre la combustión.

A continuación, se describe:

- Antecedentes y principios básicos asociados a la combustión.
- Los aspectos clave del modelo de química utilizado en este estudio.
- Una ecuación de transporte para la variable de progreso de la reacción. Con ello, un modelo de cierre para el término de la fuente química que aparece en esta ecuación.

2.1. Antecedentes

Hasta finales del siglo XX, La mayor parte de la producción mundial de energía se hacía por combustión de petróleo, carbón y gas natural (combustibles fósiles), aún cuando se ha disminuido ya hace varios años, es difícil destronar este proceso energético, considerando su bajo costo de instalación y la inercia de su uso, aún cuando existen numerosas campañas y medidas pro ambientales.

Sus aplicaciones se pueden resumir en:

- Calefacción de habitáculos (hogueras, estufas, calderas).
- Producción de electricidad (centrales térmicas).
- Propulsión (motores alternativos, turbinas de vapor y gas).
- Proceso de materiales (reducción de óxidos, fundición y cocción).
- Eliminación de residuos (incineración de basura).
- Producción de frío (frigoríficos de absorción).

- Control de incendios (barreras contrafuegos, materiales ignífugos).
- Iluminación (aunque en la actualidad está casi vetado).

El campo de la gestión energética enfrenta un *trade-off* que surge a nivel industrial y doméstico sobre el uso de recursos con bajo costo de inversión, como el uso del componente fósil, versus la tecnología disruptiva de utilizar recursos energéticos no convencionales.

2.1.1. Problemas Asociados a la Combustión

La Organización Mundial de la Salud [22] ha declarado en sus estudios que la mitad de la población mundial depende de combustibles sólidos, como la madera, el carbón, residuos agrícolas o estiércol, para satisfacer sus necesidades energéticas básicas. La energía de biomasa, que incluye la leña, residuos de cultivos y desechos de animales, provee en promedio cerca del 30 % de la energía primaria en los países en desarrollo. Más de dos mil millones de personas dependen directamente de la biomasa como principal o única fuente de energía.

Actividades domésticas como calefaccionar con combustibles sólidos en fuegos abiertos o utilizar cocinas tradicionales, generan altos niveles de contaminación del aire dentro de los hogares. A nivel global, la contaminación dentro del domicilio produce alrededor de 1.5 millones de muertes al año [22], afecta a casi la mitad de la población mundial y es responsable de aproximadamente el 4 % de la carga de enfermedades expresadas en AVAD (Años de Vida Ajustados por Discapacidad), según la OMS [23]. La población afectada es predominantemente rural y de bajos ingresos, y los más vulnerables son las mujeres, niños y ancianos.

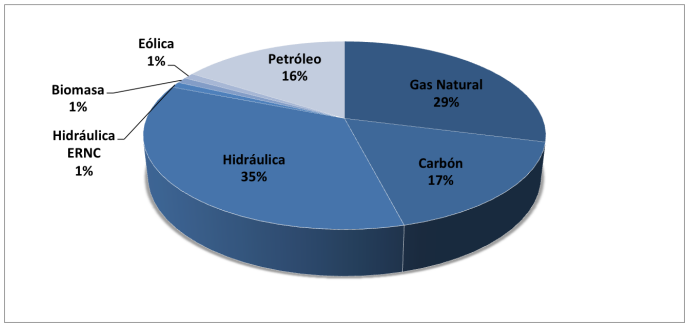
De acuerdo a la evidencia epidemiológica, en 2014, la OMS publicó las Directrices de Calidad del Aire con un resumen de la evaluación del riesgo asociado a la concentración de contaminantes, que también puede ser aplicado a la contaminación de ambientes interiores. El documento presenta una orientación numérica y metas intermedias de reducción a la exposición a largo y corto plazo de concentración de diferentes contaminantes, entre ellos el material particulado[1] MP10 y MP2.5. Las directrices se basan en las extensas pruebas científicas relativas a la contaminación del aire y sus consecuencias para la salud.

[1] MP significa Material Particulado; 10 y 2.5 es el tamaño de la partícula que es expresada en términos de su tamaño aerodinámico; su unidad de medida es $\mu g/m^3$: microgramo por metro cúbico de aire, y representa la concentración de los contaminantes.

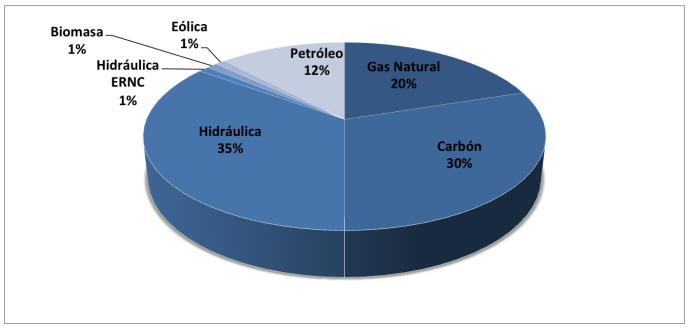
2.2. Matriz Energética de Chile

Hoy en día la matriz chilena se encuentra compuesta por recursos tanto renovables como no renovables. Un recurso renovable es entendido como un recurso natural que puede ser restaurado por procesos naturales a una mayor tasa que la de consumo por el ser humano. Entre algunos recursos naturales, se pueden mencionar la radiación solar, las mareas, el viento, entre otras. La biomasa también cae en la clasificación de un recurso renovable, siempre que la biomasa se obtenga exclusivamente de residuos forestales y agrarios, gestionados de manera sostenible, sin sobrepasar su capacidad de regeneración y sin provocar nuevos impactos no deseados.

Los recursos renovables que componen la matriz energética chilena son principalmente: eólicos, hidráulicos, de biomasa y solar; mientras que los recursos no renovables son mayoritariamente: gas natural, petróleo y carbón.



Matriz de generación SIC.



Matriz de generación SING.

Figura 2.1: Matriz energética chilena. Fuente: [4].

Actualmente, la capacidad instalada en Chile es de 15 GW [4], la componente fósil alcanza un 62 %, seguido por la componente hidráulica con un 35 %, como se muestra en la Figura 2.1. En esa misma figura es posible apreciar que la biomasa aporta aproximadamente un 1 % de la potencia generada, siendo aproximadamente 150 MW. El compromiso hoy en día es lograr un manejo más eficiente de los recursos energéticos, lo que se traduce en:

- Desarrollar y mantener un control eficaz y estrategias de manejo para el uso racional de la energía.
- La búsqueda de nuevas y mejores maneras de incrementar el rendimiento de la energía. Es necesario invertir en investigación y desarrollo.
- Desarrollar interés y dedicación al programa de gestión de energía de todos los empleados de las compañías.
- Reducir los impactos negativos; caídas de tensión o cualquier interrupción en los suministros de energía.

En la actualidad, una buena gestión de la energía representa uno de los programas de beneficio más prometedores de mejora, en lo que respecta a reducción de costos.

Un manejo eficiente de la energía ayuda al país a enfrentar problemas importantes, tales como:

- Competitividad frente a otros países.
- Producción local de energía.
- Costo y dependencia de la energía importada.

También ayuda a solucionar problemas de tipo ambientales tales como:

- Reducción de lluvia ácida.
- Limitar el cambio global del clima.
- Limitar la producción de GEI[2].

Finalmente, se hace énfasis en que más del 50 % de la matriz energética chilena utiliza el fenómeno de combustión como agente en sus procesos. Por tanto, es necesario definir el concepto de combustión.

2.3. Combustión

La combustión es una reacción exotérmica entre dos sustancias, una de las cuales es reductora - denominada combustible, y la otra oxidante denominada comburente. El fenómeno que se origina está relacionado a un gran aumento de temperatura y, generalmente, emisión de luz. La combustión está determinada por la velocidad con la que tiene lugar y la posibilidad de que se acumule calor (aumentando la temperatura). Como consecuencia, se obtienen productos y se libera calor.

A su vez, tres factores deben coexistir para que la combustión tenga lugar: combustible, comburente y energía de activación. El proceso se activa calentando el combustible por encima de su temperatura de ignición.

[2]Gases de Efecto Invernadero.

La combustión tiene lugar en fase gaseosa, de modo que la combustión de un sólido o de un líquido va precedida de la información de gases procedentes de la vaporización o de la pirólisis de parte del combustible. Lo más frecuente es que los combustibles líquidos se vaporicen y que los sólidos experimenten una destilación pirolítica. En la práctica, cuando hay sólido como combustible, el proceso de pirólisis ocurre.

La pirólisis es la descomposición de una sustancia con presencia de carbono en otras más sencillas por acción del calor. Este proceso resulta de las interacciones entre la llama y el combustible condensado caliente, y controla la tasa de liberación de calor. La interacción entre la llama y el material condensado aún no encendido controla la propagación de la llama y el crecimiento del fuego. El material condensado aún no encendido, situado delante del frente de fuego, es calentado por la llama; cuando su temperatura llega a ser suficientemente alta comienza a liberar productos combustibles gaseosos, que se mezclan con el aire ambiente para formar una mezcla inflamable. Este último puede ser encendido por la llama, asegurando el proceso de propagación. Luego, en los incendios a gran escala, la transferencia de calor de la llama a la superficie del material a encender está dominada por la transferencia de calor radiativa. La proporción relativa de los elementos producidos en la pirólisis depende de algunos factores como la velocidad a la que se produce el calentamiento, tiempo de residencia del proceso, composición del elemento pirolizado y composición del aire (cantidad de O_2). En la Figura 2.2 se detallan las principales reacciones que ocurren en el proceso de pirólisis.

De esta manera, el flujo radiativo, emitido por los productos de combustión gaseosa y el hollín, juegan un papel relevante en el crecimiento del fuego, por lo que resulta esencial predecir correctamente las concentraciones de hollín así como la correspondiente transferencia de calor radiativa [8].

Stoichiometry	Heat of reaction (kJ/mol)	Name
Biomass $\rightarrow$ char + tar + H_2O + light gas ($CO + CO_2 + H_2 + CH_4 + C_2 + N_2 + \ldots$)	>0	Biomass devolatilization
Char combustion		
$C_2 + ½O_2 \rightarrow CO$	−111	Partial combustion
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	−394	Complete combustion
Char gasification		
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	+173	Boudouard reaction
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	+131	Steam gasification
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	−75	Hydrogen gasification
Homogeneous volatile oxidation		
$CO + ½O_2 \rightarrow CO_2$	−283	Carbon monoxide oxidation
$H_2 + ½O_2 \rightarrow H_2O$	−242	Hydrogen oxidation
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2\,H_2O$	−283	Methane oxidation
$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	−41	Water–gas shift reaction
Tar reactions (**tar assumed** $C_{n\ \mathrm{and}\ m}$)		
$C_nH_m + (n/2)\,O_2 \rightarrow nCO + (m/2)\,H_2$		Partial oxidation
$C_nH_m + n\,CO_2 \rightarrow (m/2)\,H_2 + (2n)\,CO_2$		Dry reforming
$C_nH_m + nHO_2 \rightarrow (m/2{+}n)\,H_2 + nCO_2$	Highly endothermic +(200 to 300)	Steam reforming
$C_nH_m + (2n - m/2)\,H_2 \rightarrow n\,CH_4$		Hydrogenation
$C_nH_m \rightarrow (m/4)\,CH_4 + (n - m/4)\,C$		Thermal cracking

Figura 2.2: Principales reacciones que se dan en la pirólisis. Fuente: [5].

2.4. Hollín

El hollín es un producto generado en la combustión de combustibles compuestos por hidrocarburos o en la pirólisis sujeta a una alta temperatura, y corresponde a aglomerados de partículas, las cuales varían en estructura y tamaño [24]. Cuenta con carbono como su mayor constituyente y conlleva la presencia de otros elementos, como oxígeno e hidrógeno, pero en cantidades diminutas [25]. Además, dependiendo del gas que lo rodea, es posible que otras especies sean absorbidas por la superficie del hollín. La emisión de hollín desde una llama se determina por la competencia entre la formación de hollín y su oxidación. Para explicar el proceso de hollín, un modelo completo debe incluir ambos fenómenos.

Por otro lado, se podría decir que la formación del hollín es indeseable cuando existe una alta transferencia de calor por radiación producto de las partículas de hollín, dado que genera, por ejemplo, problemas en el control y extinción de incendios [26, 27]. Sin embargo, rescatando el fenómeno radiativo del hollín, trabajos anteriores han demostrado que un incremento en la producción de hollín afecta las propiedades de radiación, aumentando de esta forma la tasa de liberación de energía [28], lo que presupone un proceso más eficiente en términos del aporte de energía al sistema. Luego, se podría rescatar mayor calor necesario gracias a la gran energía que emite el hollín.

2.4.1. Características

Investigaciones experimentales han detallado que las partículas de hollín generadas en la combustión están típicamente entre 1 nm (1 $nm = 1x10^{-9}\ m$) y unos pocos micrómetros (1 $\mu\ m = 1\text{x}10^{-6}\ m$) de diámetro [29]. Pequeños radicales, tales como OH, O, H, CH y CH_2, juegan un rol importante en formación de hollín, empezando desde la iniciación química de la combustión y la posterior descomposición del combustible. Estos pequeños radicales permiten la generación de largas cadenas de hidrocarburos radicales e hidrocarburos policíclicos aromáticos (*polycyclic aromatic hydrocarbon* – PAH) [30]. La composición del carbono formado en las llamas, en forma de hollín, contiene alrededor de un 1 % en peso de hidrógeno [31].

Para poder observar una muestra de hollín experimentalmente se puede utilizar un telescopio electrónico, y la técnica para obtener hollín de una llama es el Muestreo Termoforético [32]. En esta técnica, partículas de hollín en la llama son depositadas en una grilla por termofóresis, es decir, los agregados de hollín difunden por el gradiente de temperatura que se establece entre la temperatura de la llama y la grilla de cobre, de forma tal que la alcanzan y permanecen adheridos a ella. Como se muestra en la Figura 2.3, la grilla es expuesta al interior de la llama alcanzando el centro de ésta. Las muestras obtenidas se analizan posteriormente mediante TEM (*Transmision Electron Microscopy*), dando origen a cientos de imágenes en escala de grises que permiten analizar mediante *software* de procesamiento de imagen cada uno de los agregados.

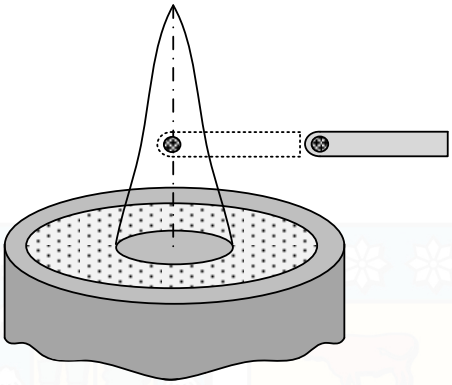


Figura 2.3: Muestreo Termoforético (TS). Fuente: [6].

2.4.2. Mecanismos de Formación

La pirólisis en una combustión rica en combustible permite la formación de precursores del hollín. La pirólisis del combustible y la formación de precursores de hollín se explica normalmente por un mecanismo cinético-químico en fase gaseosa que proporciona la entrada de especies a procesos subsiguientes. Luego, la formación del hollín envuelve una compleja variedad de procesos físicos y químicos [29, 33].

En este sentido, el crecimiento de las especies precursoras conduce a la nucleación para formar las partículas de hollín nacientes. La nucleación se entiende como el proceso en que los precursores de las partículas de hollín comienzan a formar núcleos. La naturaleza general de las partículas de hollín formadas en la nucleación son principalmente poliacetilenos, especies iónicas o PAHs). En la Figura 2.4 se presenta un esquema representativo de la formación de hollín. Después de que la primera cadena aromática es formada, ésta puede crecer y formar especies multi-cadenas aromáticas a través de una reacción HACA (*H-Abstraction-*C_2H_2*-Addition*) [34]. Luego de la nucleación y debido a la actividad de las superficies del hollín, éste puede crecer en tamaño a través de la reacción de las superficies heterogéneas con especies gaseosas. La última fase es la coagulación, en que pequeñas partículas se incorporan a cadenas más grandes y aglomerados, combinándose en largas cadenas. A pesar de que la coagulación por sí misma no cambia la masa total de partículas de hollín, sí cambia la morfología, la densidad y la distribución del tamaño de partícula. Lo anterior puede jugar un rol fundamental en la evolución estructural de las partículas de hollín.

En una llama, las partículas de hollín son eventualmente transportadas dentro de una región donde las especies oxidativas están presentes, aquí, las partículas de hollín son oxidadas a productos gaseosos, pero si la oxidación del hollín es completa, la llama no emite hollín. Las especies O_2 y OH han sido consideradas como las especies más oxidativas por su abundancia y capacidad de reacción. Por un lado, el O_2 es el mayor contribuyente en regiones de escaso combustible, mientras que OH es el mayor contribuyente en regiones ricas en combustible [6].

Los procesos de crecimiento y oxidación están supeditados a la temperatura de la zona reactiva

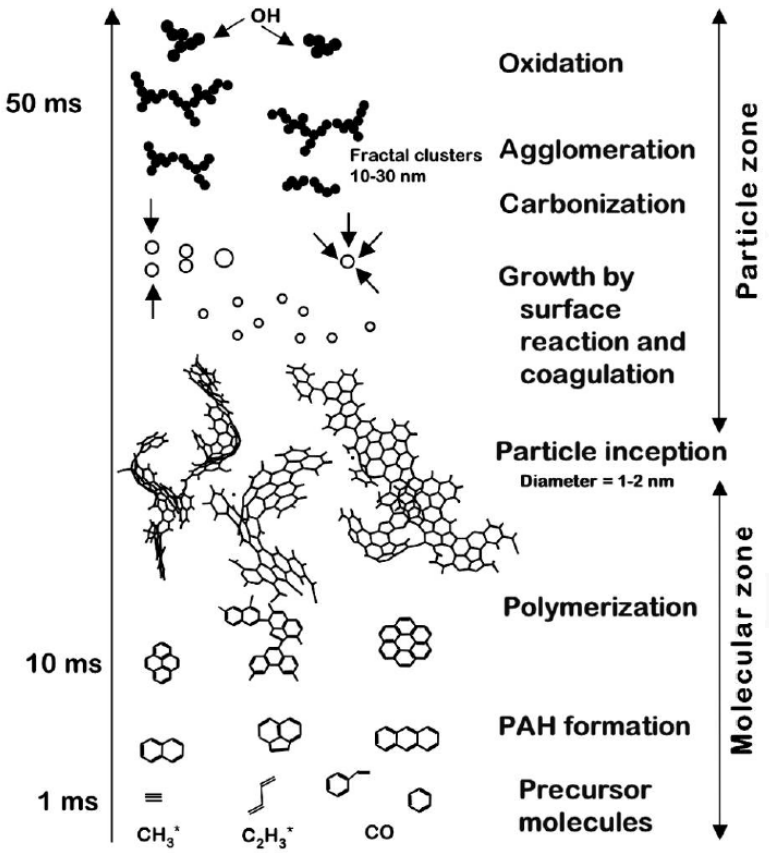


Figura 2.4: Formación de partículas en llamas. Fuente: [7].

respectiva. La presencia de oxígeno incentiva el proceso de formación, pero también promueve el efecto de oxidación al existir una mayor cantidad de moléculas de oxígeno en la zona de reacción. Con ello, existen dos principales dificultades al momento de modelar las concentraciones de hollín [8]:

1. La primera dificultad puede ser analizada en la Figura 2.5, la cual muestra las escalas de tiempo características para los diferentes procesos físicos y químicos involucrados en la combustión. Cuando la química es suficientemente rápida, vale decir, los tiempos característicos de los procesos químicos son mucho más rápidos que los del flujo, las reacciones químicas ocurren en un estado cuasi-estable y se ajustan inmediatamente a las condiciones de flujo. En este caso, la química y la mezcla pueden desacoplarse. Por tanto, se pueden generar relaciones de estado para los diferentes escalares reactivos, tales como la temperatura o la fracción en masa de las especies, como una función de un número reducido de parámetros que describen las condiciones locales del flujo (fracción de mezcla, tasa de disipación escalar y pérdida radiativa). Para la presente investigación, la forma de abordar el problema descrito anteriormente es considerado como el método tradicional. El uso de la variable de progreso viene en virtud de mejorar la estimación.

2. La segunda dificultad surge del hecho que, de manera contraria al NO y a otros contaminantes, el hollín

actúa en el flujo a través de las importantes pérdidas radiativas que produce. Como consecuencia, la formación de hollín no puede ser considerada una vez que el campo de flujo ha sido predicho. Esto implica que modelos de hollín reducidos o simplificados deben ser desarrollados considerando este tipo de aplicaciones. También se requiere tener en cuenta los procesos de formación/oxidación del hollín que son sensibles a la temperatura para predecir la transferencia de calor radiativo de una manera precisa.

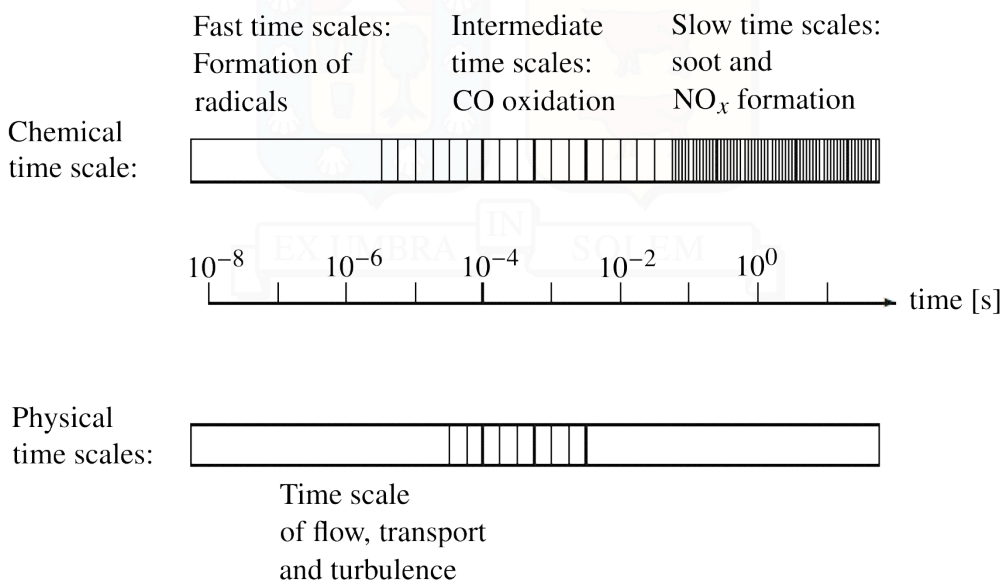


Figura 2.5: Tiempos característicos de procesos físicos y químicos. Fuente: [8].

2.5. Llamas de Difusión

Existen principalmente dos tipos de llamas coflujo, las llamas de premezcla y las llamas de difusión. Las llamas de premezcla son aquellas en que el oxidante y el combustible inicialmente se encuentran juntos y combustionan en una zona común. Una de las características de las llamas de premezcla es que en este tipo de llamas la combustión es más completa y se alcanzan mayores temperaturas. Entre los estudios más recientes de llamas de premezcla es posible encontrar a Jocher et al. [35], Carbone et al. [36] y Chen et al. [37], entre otros.

Por otro lado, se tienen las llamas de difusión, que son aquellas en que el combustible y el oxidante se encuentran inicialmente separados, para luego difundir hacia una zona de reacción desde partes opuestas de la llama. De este modo, las llamas axisimétricas de difusión en coflujo laminar tienen un campo de velocidades relativamente simple, lo que permite realizar mediciones experimentales replicables, como también modelos numéricos en sólo dos dimensiones debido a la simetría axial [10, 8].

Es posible encontrar llamas de difusión en dos formas básicas: laminares o turbulentas. Lo cual se define por su número de Reynolds, el cual es adimensional y queda expresado por la Ec. 2.1:

$$Re = \frac{u\,L_c}{\nu} \tag{2.1}$$

Donde u es la velocidad de fluido en m/s, L_c es el largo característico que es responsable de formar la capa límite de la zona de transferencia de calor en m y ν es la viscosidad cinemática en m^2/s. El número de Reynolds indica la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas presentes en un fluido. Si éste es bajo (menor al valor 2000), la llama sigue un régimen laminar; en caso contrario, la llama es turbulenta.

2.6. Concepto de Flamelet

En la naturaleza las llamas tienden a ser turbulentas. De aquí surge el trabajo realizado por Egolfopoulos et al. [38], quienes proponen modelar una llama turbulenta como un conjunto de llamas laminares estables y homogéneas. Estas llamas más pequeñas, finitas y estables, son llamadas *flamelet*. Para su representación experimental, el quemador que es capaz de generar esta llama debe ser co-anular, tal como se aprecia en la Figura 2.6. Aquí, el combustible pasa a a través del tubo central del quemador mientras que el oxidante pasa por el anillo exterior compuesto por un poroso para poder homogeneizar la salida de oxidante. A modo de ejemplo, se puede utilizar un quemador Santoro [39] o un quemador Gülder [9].

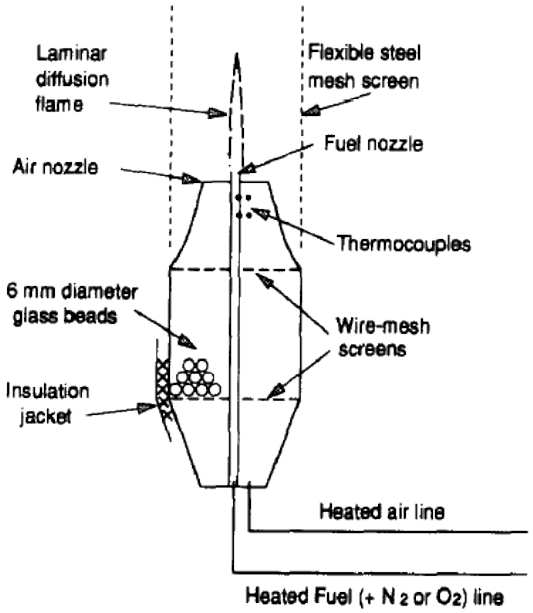


Figura 2.6: Representación esquemática de un quemador Gülder. Fuente: [9].

Para cada flamelet, se generan datos intrínsecos que se tabulan en matrices propias de escalares conservados y no conservados. Para este punto, se requiere de una fracción de mezcla que represente el nivel de mezcla entre el oxidante y el combustible. Sin embargo, se requiere de un escalar que asocie la formación de especies a un plano más químico, para lo cual se utiliza la tasa de disipación escalar [21].

Si bien la flamelet requiere de un parámetro de distancia L para representar el espacio y dimensión del contraflujo, la librería con los resultados se asocian a cada escalar de transporte en una malla que permite al código CFD interpolar la base y generar la llama integrada a lo largo de los ejes de altura y radiales. Por ende, se entiende que la llama en contraflujo se adimensiona.

2.6.1. E-EDFM: Extended Enthalpy Defect Flamelet Model

Existen varias formas de abordar el modelamiento de flamelets. Los modelos flamelet pueden ser divididos en dos grandes grupos: los modelos interactivos y los no interactivos. De esta última categoría, *Steady Flamelet Model* (SFM) y *Enthalpy Defect Flamelet Model* (EDFM) son casos ejemplares [21]. El SFM no maneja el concepto de pérdida de calor por radiación o procesos químicos complejos, por lo que el hollín está fuera de alcance. EDFM logra incorporar la transferencia de calor radiativo, pero la formulación de contaminantes no está bien determinada.

Por otro lado, los modelos de flamelet interactivos son aquellos que requieren valores del espacio físico en orden de resolver las ecuaciones involucradas de flamelet. Es por ello que esta estrategia interactiva corre secuencialmente el código CFD y el código de flamelet, comunicando ambos códigos.

Usualmente se utilizan modelos interactivos de flamelet para llamas inestables, pues logra resolver los términos transientes. Los términos transientes son retenidos en variados casos de estudio puesto que no responden rápidamente a cambios de la tasa de disipación escalar (χ) [40]. Tal como Carbonell et al. [21] indican, otros modelos aparecen en la literatura para enfrentar el modelo inestable de llama, siendo éstos los más avanzados en orden de predecir la formación de hollín y pérdidas de calor por efectos radiativos. Trabajos como el de Pierce et al. [2] han sido desarrollados con el objeto de simular la ignición y la extinción. Este trabajo aborda este fenómeno basado en el enfoque de la variable de progreso [2, 3].

Uno de los objetivos del estudio consiste en analizar y validar la respuesta de la variable de progreso en llamas estables incorporando pérdidas de calor radiativa y formación de contaminantes. Carbonell et al. [21] plantea un modelo para el defecto de entalpía que fue utilizado para el desarrollo del presente trabajo. Además, ya que se plantea la resolución de la formación lenta de contaminantes (como NOx y CO), el modelo a tratar es calificada como una extensión del modelo EDFM. Luego, se tiene el *Extended Enthalpy Defect Flamelet Model* (E-EDFM). Para este caso, se enfrenta la formación de contaminantes resolviendo la ecuación de transporte de las especies utilizando términos fuentes de formación almacenadas en la librería de flamelet. Para entender el uso de esta extensión, se presentan las variables explicativas del modelo.

2.6.1.1. Fracción de Mezcla

La fracción de mezcla de la fase gaseosa de combustible y oxidante es representada por Z. Cuando $Z = 0$ se tiene solo aire y cuando $Z = 1$ se tiene combustible puro. A su vez, Z se basa en el elemento químico C:

$$Z = \frac{Y_C - Y_{C,min}}{Y_{C,max} - Y_{C,min}} \tag{2.2}$$

con

$$Y_C = \sum_{k=1}^{K} \frac{\eta_{kC} W_C}{W_K} Y_k, \tag{2.3}$$

donde Y_k denota la fracción de masa de la especie k dentro del sistema de K especies químicas diferentes; W_C corresponde al peso molecular del elemento C y W_k al peso molecular de la especie k. η_{kC} representa el número de moles de C en la especie k.

En el modelo tradicional, las llamas no premezcladas se controlan mediante la mezcla y, por lo tanto, la fracción de mezcla parece ser el escalar más eficaz para describirlas. Cambia rápidamente de forma perpendicular al frente de llama y sigue la mezcla de combustible y oxidante. La fracción de mezcla puede ser descrito por:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{1}{Z}\frac{\partial(\rho v Z)}{\partial Z} = 0 \tag{2.4}$$

2.6.1.2. Tasa de Disipación Escalar

La tasa de disipación escalar (χ) es el parámetro que tiene en cuenta el campo de flujo en la estructura de flamelet y está definido por:

$$\chi = 2\, D_Z\, (\nabla Z \cdot \nabla Z) \tag{2.5}$$

La tasa de disipación escalar mide el grado de desviación del estado de equilibrio; tiene la dimensión de s^{-1} y puede interpretarse como la inversa de un tiempo de difusión característico, es decir, como una difusividad en el espacio de fracción de mezcla. En la superficie de la llama, $\chi = \chi_{st}$.

2.6.1.3. Defecto de Entalpía

Una forma de representar las pérdidas de calor de la llama es utilizar el defecto de entalpía. La parametrización del defecto de entalpía fue introducida utilizando el método descrito por Carbonell et al. [21]:

$$X_R = h - h_{ad} \tag{2.6}$$

donde h_{ad} es la entalpía adiabática. La temperatura es directamente obtenida en el espacio físico desde la ecuación de transporte. Luego, la entalpía se determina a partir de la temperatura y las fracciones en masa de especies.

En base a los puntos anteriores, las fracciones en masa de las especies en CFD son obtenidas de la librería como una función de la fracción de mezcla, la tasa de disipación escalar y del defecto de entalpía, es decir, $Y_k(Z, \chi, X_R)$. A la vez, tal como se mencionó, ya que el EDFM no es capaz de predecir con exactitud la formación de contaminantes (NO_x y CO), una forma de superar este problema consiste en calcular estas especies con sus ecuaciones de transporte utilizando las tasas de reacción obtenidas de la librería flamelet: $\omega_k(Z, \chi, X_R)$ en el E-EDFM [21, 2]. Se denominan modelos de flamelet extendidos a los modelos que resuelven una ecuación de transporte para algunas especies utilizando las tasas de reacción de la flamelet, mientras que las fracciones de masa de las demás especies son obtenidas de la librería de flamelet.

2.7. Variable de Progreso

Tradicionalmente, para la combustión no premezclada, una fracción de mezcla (Z) describe el estado de mezcla, mientras que para combustión premezclada (y parcialmente premezclada), se invoca una variable de progreso de reacción, que caracteriza el progreso de las reacciones químicas, siendo ésta más exacta [2]. Sin embargo, para un control exacto del progreso de la combustión, predecir con mayor precisión resulta interesante en materia investigativa. La implementación de una variable de progreso viene dada por intentar leer la llama en las condiciones en que la tasa de disipación escalar no responde con exactitud, sea el caso de la ignición, extinción, u otro fenómeno donde la fracción de mezcla no logra abordar eficazmente, como es el caso de una llama elevada (efecto de *lift-off*) [41, 42].

La variable de progreso viene dada por la suma de fracciones de masa de dos de las principales moléculas obtenidas de la combustión, el CO_2 y el H_2O.

$$Y_{PV} = Y_{CO_2} + Y_{H_2O} \tag{2.7}$$

Como la variable de progreso viene dada por CO_2 y H_2O, ésta adquiere un carácter de seguimiento en la formación del hollín, y por tanto, podría permitir describir de buena manera el proceso de combustión. Complementando, un modelo basado en la fracción de la mezcla solo es incompleto, porque la fracción de la mezcla no contiene ninguna información intrínseca sobre reacciones químicas. Ya que se necesita al menos un escalar adicional, y como la fracción de mezcla representa el transporte de escalares conservados (que no participa en reacciones químicas), a través de la tasa de disipación escalar, el o los escalares de seguimiento adicionales deben ser no conservados. Para este caso se utiliza la variable de progreso.

Para incluir la variable de progreso, una ecuación de conservación debe ser definida, y con ello, una tasa de formación de reacción química en masa ω_{PV} debe ser formulada según:

$$\omega_{PV} = \omega_{H_2O} + \omega_{CO_2} \tag{2.8}$$

A nivel de CFD, la siguiente ecuación debe ser utilizada:

$$\frac{\partial \rho Y_{PV}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v Y_{PV}) - \nabla \cdot \left(\frac{1}{Le_{PV}} \frac{\lambda}{c_p} \nabla Y_{PV} \right) = \omega_{PV} \tag{2.9}$$

donde el número de Lewis $Le_{PV} = \lambda / \rho D_k c_p$, con D_k el coeficiente de difusión de la especie k.

Siguiendo el trabajo de Pierce y Moin [2], la variable de progreso es empleada en vez de la tasa de disipación escalar a nivel de simulación en CFD. Esta modificación ha probado conducir a mejores resultados en llamas de gas turbulento, no sólo en las llamas donde predominan los regímenes de combustión premezclados, sino también en las llamas dominadas por regímenes de combustión no premezclados [3].

2.8. Índice de Oxígeno

La medida que indica las distintas composiciones del flujo oxidante es el índice de oxígeno (OI [3]), que se define como la concentración de oxígeno presente en el flujo de oxidante que está compuesto por un diluyente determinado. El índice OI viene dado por la Ec. 2.10.

$$OI = \frac{\dot{\xi}_{oxigen}}{\dot{\xi}_{oxigen} + \dot{\xi}_{diluent}} \tag{2.10}$$

Para la Ec. 2.10, $\dot{\xi}$ corresponde al flujo volumétrico del gas. El diluyente puede ser nitrógeno (N_2), argón (Ar), helio (He) o dióxido de carbono (CO_2). Se utilizó el primero de ellos.

[3] OI: Oxigen Index.

Al variar el OI, se generan cambios en la zona reactiva de la llama, principalmente en la temperatura de la llama, y por ello, en la radiación que se emite; también se ve afectada la concentración de las especies presentes, afectando los procesos de formación y oxidación. Una concentración de oxígeno mayor permite oxidar la partícula de hollín [8], tal como lo hace un catalizador de vehículos (se produce hollín y se obtiene energía de combustión y después se oxida para que el hollín no escape al ambiente como el contaminante que es). Para entender de mejor manera cómo varían los procesos de formación y oxidación es necesario estudiar la fracción en volumen de hollín a los distintos OI estudiados. Se estudió un caso para OI 21 %.

Escudero et al. [1] realizaron un trabajo con tres distintos tipos de combustibles: etileno, propano y butano. La llama de etileno presentada fue considerada para contrastar resultados.

3 | Metodología de Trabajo

Para llevar a cabo el modelo numérico se utilizaron códigos en lenguaje Fortran, sujeto al uso del software e interfaz Eclipse ®, mediante el cual se desarrollaron las bases de flamelet y se llevó a cabo la simulación en CFD. El esquema de la Figura 3.1 resume el trabajo desarrollado e indica los archivos más relevantes en el proceso de construcción de la librería flamelet, la cual es consultada finalmente por CFD.

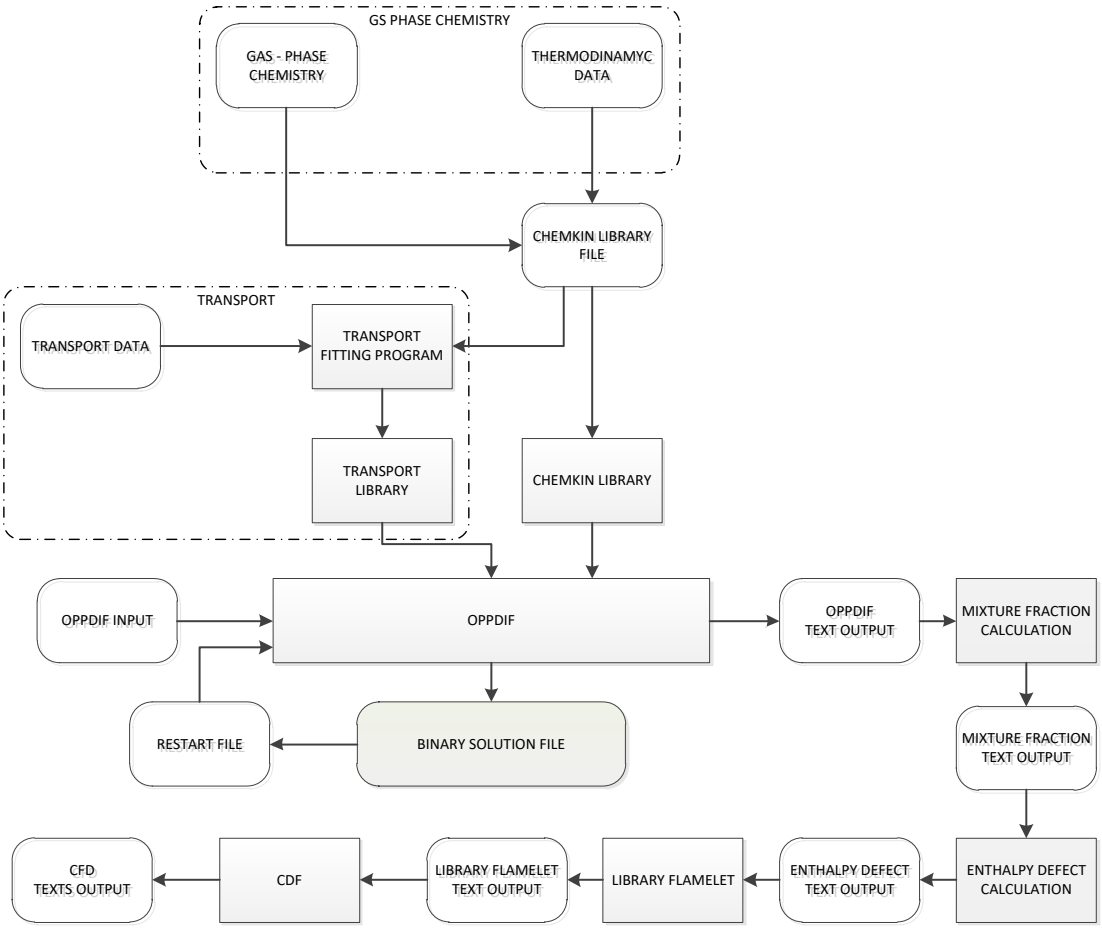


Figura 3.1: Esquema del método numérico empleado. Fuente: Elaboración propia.

La base flamelet viene representada por el cuadro LIBRARY FLAMELET, el cual es tomado y leído por el código CFD, quien interpola valores para la variable de progreso Y_{PV} para suplir las diferentes variables de combustión asociadas. La parametrización Φ describe la dependencia de cada variable Ω_Φ asociada a la combustión de la llama simulada para el método tradicional y Ψ la parametrización de la variable Ω_Ψ bajo el enfoque de variable de progreso.

$$\Phi = \Omega_\Phi \left(Z, \chi_z, X_R\right) \tag{3.1}$$

$$\Psi = \Omega_\Psi \left(Z, Y_{PV}, X_R\right) \tag{3.2}$$

Tal como se indicó en la Sección 2.6.1, la combustión de llama sin variable de progreso fue simulada utilizando el modelo E-EDFM, el cual es capaz de predecir con exactitud la formación del hollín y calcula la relación de estado para un escalar como una función de fracción de mezcla (Z), la tasa de disipación escalar (χ) y un parámetro de defecto de entalpía (X_R). Para la base flamelet con variable de progreso se realiza el mismo procedimiento anterior, solo que χ es reemplazado por la variable de progreso al momento de simular la llama en CFD. La librería de flamelet fue generada de la configuración de contra-flujo a través del código OPPDIF, que utiliza las subrutinas de CHEMKIN, y teniendo en cuenta una serie de tasas de estiramiento, que van desde valor del orden de los $5^{-1}\ \ s^{-1}$, hasta el decaimiento total. Se utilizó un completo esquema de cinética química de 70 especies y 463 reacciones químicas [43].

El código CFD utiliza como base de datos la librería de flamelet previamente desarrollada, permitiendo así la simulación de la llama a diferentes condiciones de flujo, mallado y tipo de quemador. Para este trabajo de simulación se utilizó un quemador Gülder.

Para la visualización de los datos de salida del modelo, realizar gráficos y comparaciones, se empleó el software Tecplot ®.

3.1. Ecuaciones Gobernantes

En el presente capítulo se presentan las ecuaciones que gobiernan el modelo de flamelet implementado para simular la combustión de una llama de contraflujo axisimétrica, junto a los parámetros que son necesarios para la simulación de las reacciones químicas que ocurren en el proceso de combustión.

Las ecuaciones de flamelet son una forma simplificada de las ecuaciones de especies y de transporte de energía. El concepto flamelet se basa en la idea de que la capa de reacción es delgada. Con esta suposición, las especies y las ecuaciones del transporte de energía se pueden transformar del espacio físico a otro espacio Z.

En las siguientes ecuaciones, Z representa la dirección axial x de la geometría presentada en la Figura 3.2.

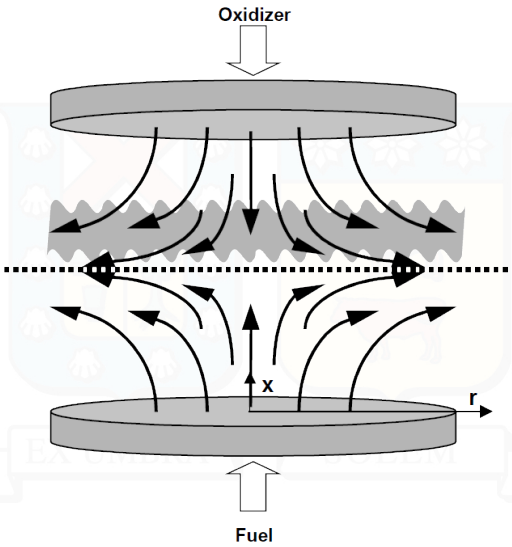


Figura 3.2: Geometría de la llama de difusión de flujo opuesto axisimétrica. La línea segmentada representa la línea de estancamiento; la región sombreada indica la llama. Fuente: [10].

La ecuación de conservación de masa en estado estable en coordenadas cilíndricas es [10]:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{1}{Z}\frac{\partial(\rho v Z)}{\partial Z} = 0 \tag{3.3}$$

donde u y v son las componentes de la velocidad axial y radial, y ρ es la densidad. Siguiendo la referencia de los estudios realizados por Von Karman [44], quien dice que los escalares mencionados varían a lo largo de x, se definen:

$$A(x) = -\frac{\rho v}{Z}$$

$$B(x) = \frac{\rho u}{2}$$

para los cuales la ecuación 3.3 es reducida a:

$$A(x) = \frac{dB(x)}{dx} \tag{3.4}$$

Como $A(x)$ y $B(x)$ están en función de x, las variables contenidas también lo son (ρ, u, T y Y_k).

La ecuación de momento es:

$$H - 2\,\frac{d}{dx}\left(\frac{AB}{\rho}\right) + 3\,\frac{A}{\rho} + \frac{d}{dx}\left[\mu\,\frac{d}{dx}\left(\frac{A}{\rho}\right)\right] \tag{3.5}$$

donde H es un valor propio, constante, que satisface la ecuación del momento y está dado por:

$$H = \frac{1}{Z}\frac{\partial p}{\partial Z} \tag{3.6}$$

La ecuación de conservación de energía es:

$$\rho u\frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p}\frac{d}{dx}\left(\lambda\,\frac{dT}{dx}\right) + \frac{\rho}{c_p}\sum_k c_{pk}Y_kV_k\frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p}\sum_k h_k\,\dot{\omega}_k + \delta\frac{\dot{q}_R}{c_p} = 0 \tag{3.7}$$

donde λ es la conductividad térmica, c_p el calor específico y δ representa un factor de pérdidas de calor radiativo. La radiación de la llama es modelada usando el *Optically Thin Model* (OTM) [21]. Este modelo desprecia la absorción en contraste a la emisión, de modo que el flujo de calor radiativo volumétrico en la ecuación de energía, $\dot{q}_R$, viene dado por:

$$\dot{q}_R = 4\sigma T^4\sum_{k=1}^{K}(p_k\kappa_{P,k}) - 4\sigma T_\infty^4\sum_{k=1}^{K}(p_k\kappa_{I,k}) \tag{3.8}$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann; p_k es la presión parcial de la especie k; $\kappa_{P,k}$ y $\kappa_{I,k}$ son los coeficientes medios de Plank y de absorción incidida de la especie k; y T_∞ es la temperatura ambiente. Se aplicó el supuesto de que solo las partículas de agua y dióxido de carbono emiten radiación como cuerpo negro, mientras que la radiación de las demás especies se despreciaron. Por consiguiente, la Ec. 3.8 se restringe al H_2O y al CO_2.

La ecuación de conservación de especies es:

$$\rho u\frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx}(\rho Y_kV_k) - \dot{\omega}_kW_k = 0 \qquad k = 1, ..., K \tag{3.9}$$

donde las velocidades de difusión están dadas por la formulación multicomponente:

$$V_k = \frac{1}{X_k\overline{W}}\sum_{j\neq k}^{K}D_{k,j}\frac{dX_j}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k}\frac{1}{T}\frac{dT}{dx} \tag{3.10}$$

donde $\overline{W}$ es el peso molecular ponderado de las especies, $D_{k,j}$ el coeficiente de difusión multicomponente y D_k^T el coeficiente de difusión térmico, ambos asociados a la especie k.

Las condiciones de borde para los flujos de combustible (F) y oxidante (O) en las boquillas son:

$$x = 0: \; B = \frac{\rho_F u_F}{2}; \; A = 0; \; T = T_F; \; \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F \tag{3.11}$$

$$x = L: \; B = \frac{\rho_O u_O}{2}; \; A = 0; \; T = T_O; \; \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_O \tag{3.12}$$

3.2. Generación de Base Flamelet

Para la construcción de la base flamelet, OPPDIF[4] requiere subrutinas de los paquetes de software CHEMKIN, TRANSPORT y TWOPNT [10]. De esta manera, OPDDIF accede a las librerías creadas para procesarlas junto a los datos de entrada en un archivo, computándolos para generar la solución dada por tres archivos de texto, un *output* con la solución (.dat), un *output* con la solución explicada (.out) y otro binario (.bin). El primero es el que se usa para el siguiente cálculo; el segundo indica si la solución está correctamente resuelta; finalmente, el binario ayuda a que una nueva solución, con un *input* similar al de la solución anterior, converja.

TWOPNT hace un refinado en el mallado de análisis, añadiendo puntos donde sea necesario resolver la primera y segunda derivada de la solución. El número máximo establecido fue 900. En general, se observó que la mayoría de las soluciones tomó un mallado entre los 80 y 200 puntos. Ya que este último parámetro modifica las dimensiones del compilador principal de OPPDIF (drive.f), otros parámetros auxiliares deben ser cambiados. Para este caso, LENRWK=40000000, LENIWK=80000, LENLWK=1000, LENCWK=200, LIN=5, LOUT=7, LINKCK=25, LINKMC=35, LREST=14, LSAVE=15, LRCRVR=16.

Para lo que sigue, crear la colección de datos sirve para definir un marco estructural en cómo se analiza cada una de las variables y propiedades de la llama, siendo el primer paso para generar una base flamelet. La generación de los perfiles de temperatura y especies de flamelet para cada tasa de disipación escalar en un punto estequiométrico χ_{st} en condiciones adiabáticas, parte del perfil que logre la máxima temperatura posible (condición adiabática) y finaliza en un perfil muy cercano a la extinción.

3.2.1. Perfiles de Flamelet para Condiciones Adiabáticas

La base flamelet a utilizar requiere como punto de partida la generación de los perfiles de temperatura y especies que sirvan para cada χ en condición adiabática. A nivel de código, el perfil de temperatura es un *input* de χ. Cada perfil de temperatura se genera según una configuración física del sistema. En el enfoque estándar de flamelet, la llama está en una configuración de contraflujo entre el combustible y el oxidante,

[4] Opposed-Flow Diffusion Flames.

con un perfil de velocidad axial $u(x) = -\alpha \cdot x$, donde α es la tasa de deformación [45, 46]. Esta última se define para una sección de llama que sufre deformaciones sólo a lo largo de su eje longitudinal con respecto al tiempo. Indica que la velocidad del flujo va decreciendo con una pendiente α a medida que se recorre x.

El campo de velocidad viene dado por la suma de las velocidades de los flujos asociados al oxidante y al combustible, puesto que son flujos opuestos. Se asumió que la velocidad del oxidante u_O es la misma que la del combustible u_F. Se asumió también una distancia fija $L = 6\ cm$ que corresponde a la distancia entre las boquillas. Para un $x = 0$ se tendrá combustible puro, mientras que para $x = L$ se tendrá oxidante puro, tal como se describe en las ecuaciones 3.11 y 3.12. Entonces:

$$\alpha = \frac{u(x)}{x} = \frac{u_F + u_O}{L} = \frac{2 \cdot u_F}{L} \tag{3.13}$$

El largo de la zona de mezcla es establecida en $0.35 \cdot L$ y el ancho en $0.50 \cdot L$ [10].

Parámetro	**Valor**
Distancia a la cual la condición de borde termina cm	6
Distancia de la región de mezcla central cm	2.1
Ancho de la región de mezcla cm	3
Velocidad de entrada del combustible cm/s	$6 \cdot \alpha/2$
Velocidad de entrada del oxidante cm/s	$6 \cdot \alpha/2$
Temperatura de entrada del combustible K	300
Temperatura de entrada del oxidante K	300
Índice de oxígeno	21 %

Tabla 3.1: Condiciones iniciales de transporte y de difusión de llama para un α, ingresados en el *input* de OPPDIF [10].

En referencia a la Tabla 3.1, un conjunto de tasas de deformación α_n es establecido de acuerdo a un rango acotado según las tasa de deformación que representan la mayor temperatura y la menor temperatura antes de la extinción; que corresponde a la menor y mayor tasa α, respectivamente. Luego, se mide el pico de temperatura de ambas curvas con el objetivo de establecer una pérdida de temperatura razonable para generar los perfiles de flamelet en condiciones adiabáticas. Se refina aún más la discretización para la zona de tasas de deformación pequeñas, ya que según los análisis de uso de datos del código CFD, al momento de simular, los datos que más se utilizan son los correspondientes a las curvas de tasas menores. Se tomó como referencia la distribución de las tasas de deformación ocupadas por Soussi [47] y se realizó una interpolación para hallar las tasas de deformación adecuadas para OI 21 %, donde 14 tasas son establecidas (ver Tabla 3.3).

Considerando que aunque la configuración de contraflujo conduce a una estructura de llama de difusión esencialmente unidimensional, el asumir este principio en toda la llama implica que en los contornos se viola la ecuación de continuidad. Para ello, un contraflujo local inverso debe ser experimentado en estos puntos de la llama. En flujos parabólicos, una estrategia común es evaluar una característica χ_{st} en cada altura (o posición) de la llama, donde la localización de Z_{st} es encontrada y χ_{st} es calculada usando la Ec. 2.5.

El valor obtenido en $Z = Z_{st}$ se utiliza para todas las posiciones radiales a esta altura, lo que implica que se utiliza el mismo perfil de flamelet para todas estas posiciones. Cuando el valor radial máximo de Z es menor que Z_{st} a cierta altura, se utiliza este valor máximo de Z para evaluar las condiciones estequiométricas. Cuando χ es condicionada a condiciones estequiométricas para cada altura, el modelo se indican por χ_{st}. Sin embargo, ya que χ se calcula a partir de Z según la Ec. 2.5, para este trabajo se calculó un χ para cada Z. Por ende, las demás variables de la librería pasan a ser variables ordenadas de la fracción de mezcla, tal como se mencionó al inicio de la Sección 3.1.

Por otro lado, el OI define el balance de la reacción química utilizada por OPPDIF. La reacción balanceada para un mol de etileno es:

$$C_2H_4 + 3 \cdot O_2 + 3 \cdot \left(\mathrm{OI}^{-1} - 1\right) \cdot N_2 \longrightarrow 2 \cdot CO_2 + 2 \cdot H_2O + 3 \cdot \left(\mathrm{OI}^{-1} - 1\right) \cdot N_2 \tag{3.14}$$

de donde las fracciones de mezcla de los productos son obtenidas. Se establecieron, además, los campos entregados en la Tabla 3.2.

OI	Parámetro	Valor
21 %	Fracción de mezcla de producto CO_2	0.1308
	Fracción de mezcla de producto H_2O	0.1308
	Fracción de mezcla de producto N_2	0.7383
	Temperatura máxima K	2400

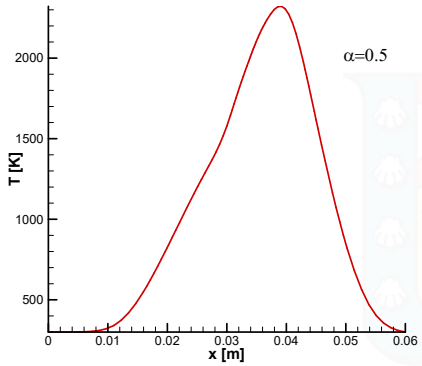
Tabla 3.2: Condiciones asociadas al OI establecido.

$\alpha_{21\,\%}$ s^{-1}
0.5
0.75
1
2
5
10
20
50
100
200
440
600
800
900

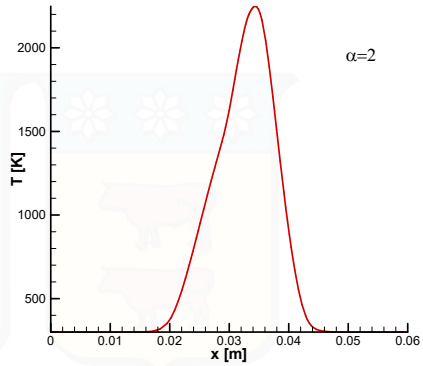
Tabla 3.3: Tasas de deformación utilizadas.

Si se examinan los perfiles de temperatura para las diferentes tasas de disipación escalar, a medida que se aumenta la velocidad de los flujos (α aumenta), la llama se comprime y se vuelve más aguda. Por otro lado, para tasas de deformación bajas, la llama tiende a formarse más cerca del oxidante, tal como se aprecia en la Figura 3.3.a y como se esquematiza en la Figura 3.2. La llama inicia en el centro axial y tiende a

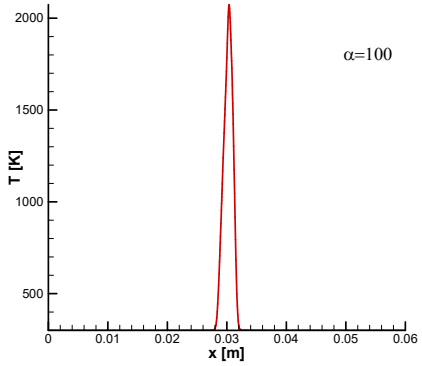
desplazarse hacia donde hay más oxígeno con el cual reacciona y se mantiene encendida.



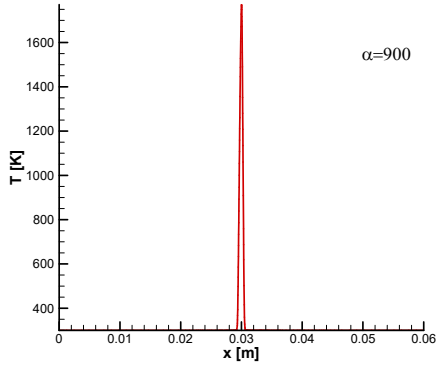
(a) Tasa de deformación 0.5 s^{-1}.



(b) Tasa de deformación 2 s^{-1}.



(c) Tasa de deformación 100 s^{-1}.



(d) Tasa de deformación 900 s^{-1}.

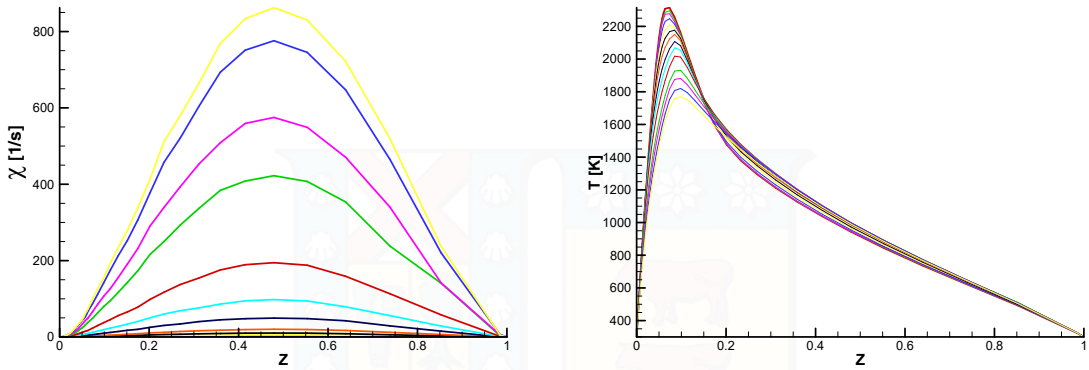
Figura 3.3: Perfiles de temperatura en condiciones adiabáticas respecto al eje axial. Fuente: Elaboración propia.

Se hace mención a que si la llama presenta una alta tasa de deformación, mayor tasa de disipación escalar tendrá. Es decir, a lo largo del eje radial, la llama difunde más rápido, justo al centro de la colisión de los flujos (zona de estancamiento, donde la llama escapa en sentido perpendicular al eje axial de los flujos).

El cálculo de la fracción de mezcla indica que $Z_{st} = 0.06373$. Los valores de χ para condiciones adiabáticas se presentan en la Tabla 3.4.

3.2.2. Perfiles de Flamelet para Condiciones No-Adiabáticas

Tal como se mencionó, la generación de los perfiles de flamelet no-adiabáticos son resueltos mediante las ecuaciones de flamelet de temperatura y especies para un determinado χ_{st} y para 8 valores diferentes del



(a) Perfiles de χ. **(b)** Perfiles de temperatura para cada χ_{st}.

Figura 3.4: Perfiles para χ en condiciones adiabáticas con OI 21 % respecto a Z. Fuente: Elaboración propia.

χ_{st} s^{-1}
0.06918
0.09654
0.12216
0.23342
0.54671
1.03086
1.96147
4.87560
9.39307
17.16044
38.50756
49.74827
67.51732
73.99395

Tabla 3.4: Tasas χ_{st} calculadas para OI 21 %.

de radiación volumétrica. El máximo factor δ corresponde a la mayor pérdida de calor por radiación, y es encontrado por ensayo y error de forma que la temperatura en la fracción de mezcla estequeométrica ($Z = Z_{st}$) resulte al rededor de 1500 K una vez realizada la librería final [47].

Para estimar qué valores de pérdida de calor por radiación se deben utilizar, se formuló una función polinomial cúbica de la temperatura entre las cotas de máxima temperatura y la de mínima temperatura; y se dejó como variable explicativa el parámetro δ. Con este simple modelo se logra identificar qué valores de δ permiten conseguir las temperaturas equidistantes que dividen este rango de temperatura máxima y mínima. De esta manera, se logra establecer perfiles de temperaturas equidistantes que facilitan la interpolación al momento de generar la librería final.

En la Figura 3.5 se presentan los diferentes perfiles de temperatura y de defecto de entalpía debido a la aplicación de los parámetros de pérdida δ para un caso de tasa deformativa (α =0.5 s^{-1} con OI=21 %). El

comportamiento es el mismo en los demás perfiles de flamelet.

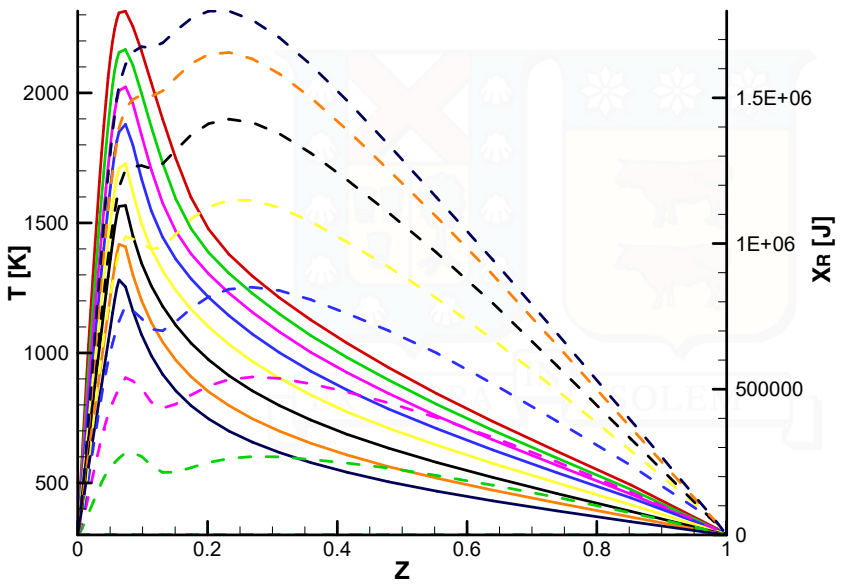


Figura 3.5: Perfiles de defecto de entalpía de flamelet para $\alpha = 0.5$ con OI 21 %. Fuente: Elaboración propia.

Para la inclusión de la variable de progreso, los cambios recaen en definir la variable de progreso como la suma de las fracciones de masa de agua y dióxido de carbono, agregándolas al contador de especies; y en guardar las tasas de reacción en masa de estas mismas especies. Ya que la variable de progreso es una composición de especies, y dada su versatilidad incluso desde su origen, se procedió a guardar todos los términos fuentes de reacción $\dot{\omega}_k$ $mol/cm^3/s$. La estrategia recae en que en la librería final se creen nuevas combinaciones de especies que definan la variable de progreso para trabajos posteriores. A nivel de código, las fracciones en masa son identificados como FMK(6,N) y FMK(16,N) para el H_2O y CO_2, respectivamente. Por su parte, las tasas fueron denominadas WDOTj, donde su incorporación supone modificaciones a nivel de formato que deben ser corregidos: 70 nuevas columnas son impresas en los archivos de texto de salida.

Así, una librería flamelet puede representarse como un cubo de datos que almacena valores para cada combinación de Z, χ y X_R en el método tradicional o Z, Y_{PV} y X_R en el método implementado. Se hace mención a la directa relación que existe entre la temperatura y la variable de progreso (ver Figura 3.6).

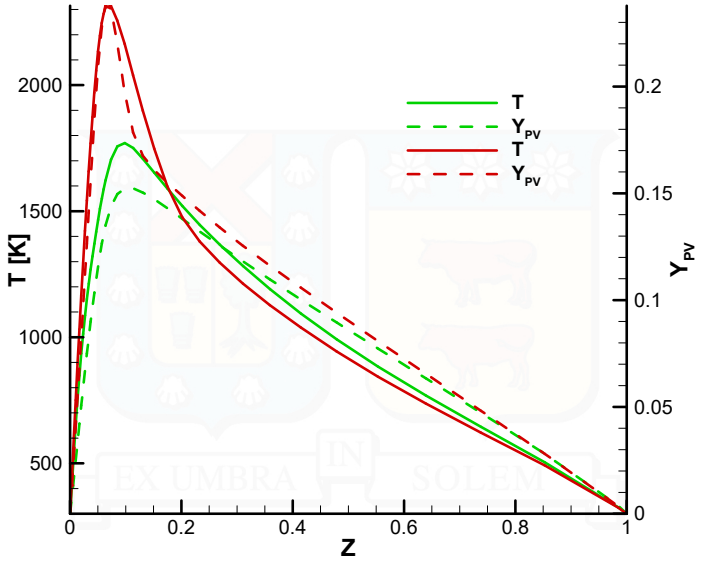


Figura 3.6: Relación de temperatura y variable de progreso para α =0.5 s^{-1} (curva roja) y α =900 s^{-1} (curva verde) en condiciones adiabáticas. Fuente: Elaboración propia.

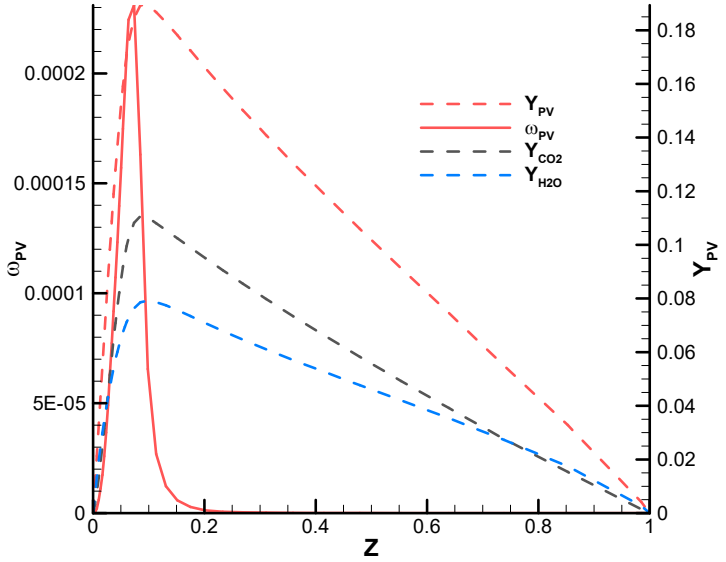


Figura 3.7: Variable de progreso con su tasa de reacción en $mol/cm^3/s$ y fracciones en masa de las especies que la conforman en el espacio de Z para un α=440 s^{-1}. Fuente: Elaboración propia.

3.3. Simulación en CFD

Para simular la llama, se modeló un quemador y se utilizaron condiciones de entrada que resolvieron dos y tres ecuaciones de transporte para el método base y el implementado, respectivamente. Un esquema representativo presentado en la Figura 3.8 muestra la llama seccionada en 89 x 320 celdas. El índice de oxígeno se ajusta con las proporciones de los flujos del oxidante.

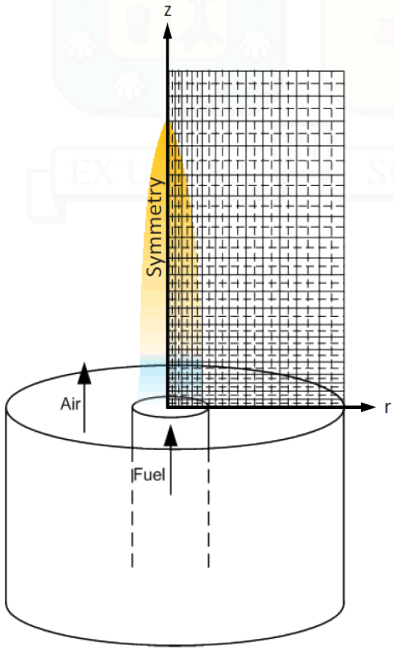


Figura 3.8: Esquema del dominio de una llama co-flujo axisimétrica. Fuente: Elaboración propia.

3.3.1. Quemador y Condiciones de Entrada

El quemador utilizado en este estudio es una réplica del quemador Gülder [48], que consiste en un tubo vertical de 10.9 *mm* de diámetro interno para el flujo de combustible y uno concéntrico co-anular de 100 *mm* de diámetro interno para el flujo de oxidante. El combustible gaseoso fue inyectado en el quemador a condiciones atmosféricas con un caudal volumétrico constante de 2.023 cm^3/s. Esta condición se basó en los estudios de Escudero et al. [1], para el cual la llama está bajo el *Smoke Point* (SP). Éste último se define como la altura visible de una llama en la que comienza a liberar partículas de hollín [6]. Es decir, el tiempo de residencia está considerado.

3.3.2. Método de Consulta

Para la simulación de la llama en CFD a través del concepto de flamelet, el método propone una librería que almacena valores de consulta que la llama requerirá al calcular un $Z = Z_{(i_0)}$ a través de la ecuación de transporte para todo el dominio. Este $Z_{(i_0)}$ es el parámetro de consulta que, ingresando en el eje de fracción de mezcla de la matriz tridimensional (librería), obtendrá los valores de las demás variables que explican la combustión. Además de la fracción de mezcla, la simulación calcula la tasa de disipación escalar y la entalpía a través de sus ecuaciones de transporte. En consecuencia, las variables calculadas para todo el dominio siguen la parametrización $\Phi = \Omega_\Phi$ antes mencionada. Ya que en el modelo de variable de progreso el dominio viene dado por la parametrización $\Psi = \Omega_\Psi$, se debe incluir el cálculo de las fracciones de masa del H_2O y el CO_2. Es decir, la variable de progreso Y_{PV} sirve de parámetro de consulta en la librería flamelet. La librería contiene tanto la información de χ como la de Y_{PV}. Por lo tanto, a nivel del CFD, la consulta es modificada: la interpolación que viene dada por χ es cambiada a una homóloga dada por Y_{PV}. La Figura 3.9 muestra el orden de los datos en un plano bidimensional sin presentar X_R por simplicidad visual. El parámetro Ω es la variable consultada.

La manera de interpolar en el código se basa en seccionar dos perfiles consecutivos, realizando una interpolación lineal entre los parámetros de entrada y la variable consultada. Dado que se utiliza Z, χ, Y_{PV} y X_R para interpolar (sea el caso), se definen variables β en función la variable calculada en CFD y representan la razón de las diferencia de la variable de entrada y la menor del rango sobre la diferencia de las variables de mayor y menor rango. Es decir, se trata de la proporción de las distancias. De esta manera se puede asignar valores continuos a las variables explicadas desde una data discreta.

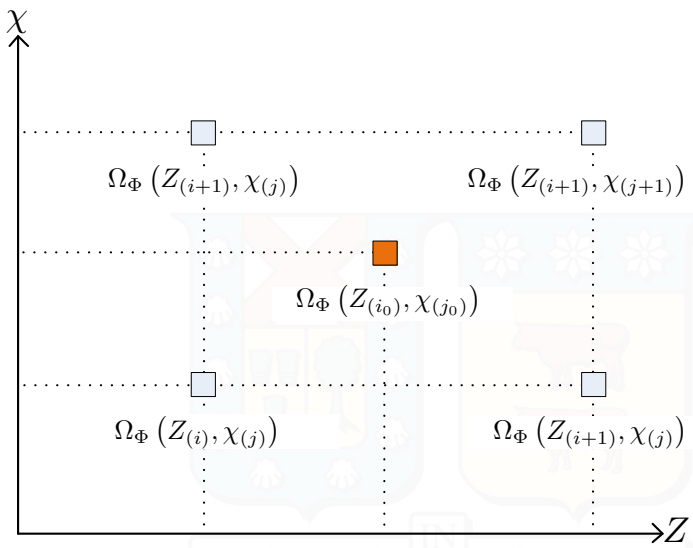
$$\beta_i = \beta_Z = \frac{Z_{(i_0)} - Z_{(i)}}{Z_{(i+1)} - Z_{(i)}} \tag{3.15}$$

$$\beta_j = \left\{ \beta_\chi = \frac{\chi_{(j_0)} - \chi_{(j)}}{\chi_{(j+1)} - \chi_{(j)}} \ \vee \ \beta_{Y_{PV}} = \frac{Y_{PV(j_0)} - Y_{PV(j)}}{Y_{PV(j+1)} - Y_{PV(j)}} \right\} \tag{3.16}$$

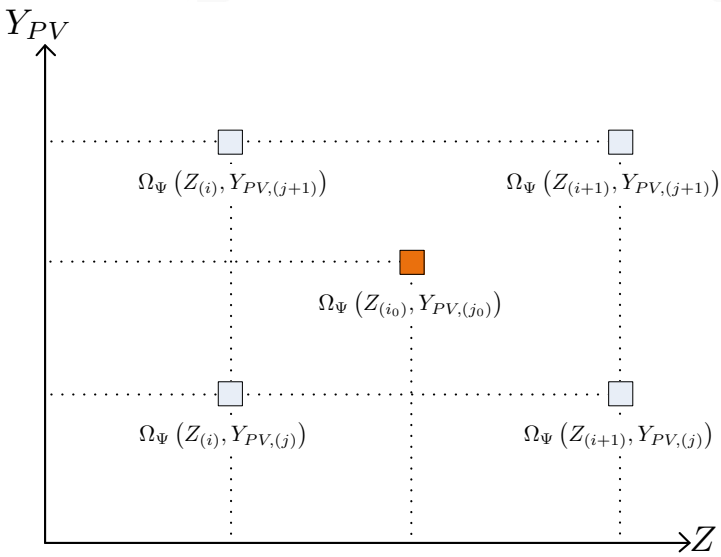
$$\beta_{X_R} = \frac{X_{R(l_0)} - X_{R(l)}}{X_{R(l+1)} - X_{R(l)}} \tag{3.17}$$

Para definir la variable de progreso, las especies que conforman esta variable deben ser obtenidas desde la librería. Utilizando la interpolación de Z y los perfiles de temperatura, se obtiene la información de las especies que seguirían de mejor forma el progreso de la combustión.

A modo de ejemplo, si la variable interpolada es la fracción en masa de la k-ésima especie producida para ciertos parámetros de entrada, la parametrización sería $\Omega_\Psi = Y_k\,(Z, Y_{PV}, X_R)$ y su despeje de la primera interpolación (en Z) viene resuelta por una regresión lineal para un espacio virtual dado entre perfiles de



(a) Esquema de cosulta de χ y Z.



(b) Esquema de cosulta de Y_{PV} y Z.

Figura 3.9: Parámetros a interpolar en dos dimensiones. Fuente: Elaboración propia.

fracciones de mezclas conocidos dado por β_i y una sección de 0 hasta la mayor fracción de masa del perfil $Y_{k(i+1)}$. Para esta primera interpolación, se tiene:

$$\beta_i = \frac{Z_{(i_0)} - Z_{(i)}}{Z_{(i+1)} - Z_{(i)}} = \frac{Y_k - 0}{Y_{k(i+1)} - 0} \tag{3.18}$$

de donde se despeja Y_k:

$$Y_k = \beta_i \, Y_{k(i+1)} \tag{3.19}$$

Luego, los parámetros β son pendientes de la interpolación. Además, tal como se observó en los perfiles, el ascenso por la curva se da por los dos lados. Luego, a nivel de código, se estableció una condición para que se logre interpolar por ambos lados de la curva. Dependiendo del caso, si el ascenso por la curva es de izquierda a derecha, la mayor fracción de masa viene dado por $Y_{k(i)}$ y se establece una pendiente $(1-\beta_i)$. Luego, la Ec. 3.19 se complementa de la siguiente manera:

$$Y_k = \beta_i \, Y_{k(i+1)} + (1-\beta_i) \, Y_{k(i)} \tag{3.20}$$

Finalmente, como existe un cruce tridimensional de datos para la interpolación de la variable Y_k, el cálculo viene dado por la combinación de cada caso:

$$\begin{aligned} Y_k \quad = \quad & \beta_i \, \beta_j \, \beta_l \, Y_{k(i+1,j+1,l+1)} + (1-\beta_i) \, \beta_j \, \beta_l \, Y_{k(i,j+1,l+1)} \\ & + (1-\beta_i) \, (1-\beta_j) \, \beta_l \, Y_{k(i,j,l+1)} + (1-\beta_i) \, \beta_j \, (1-\beta_l) \, Y_{k(i,j+1,l)} \\ & + \beta_i \, (1-\beta_j) \, \beta_l \, Y_{k(i+1,j,l+1)} + \beta_i \, (1-\beta_j) \, (1-\beta_l) \, Y_{k(i+1,j,l)} \\ & + \beta_i \, \beta_j \, (1-\beta_l) \, Y_{k(i+1,j+1,l)} + (1-\beta_i) \, (1-\beta_j) \, (1-\beta_l) \, Y_{k(i,j,l)} \end{aligned}$$

De esta manera, la variable explicada que proviene de un conjunto de escalares previamente calculados describirá el progreso de la combustión en la simulación de la llama. Los resultados de la llama simulada utilizando χ e Y_{PV} son presentados en el Capítulo 5.

4 | Estado del Arte

En este capítulo se realiza una revisión bibliográfica sobre el uso de la variable de progreso por parte de la comunidad científica. Se revisaron algunos trabajos llevados a cabo por investigadores expertos en el área. Éstos fueron utilizados como estudios de validación.

4.1. Pierce & Moin 2004

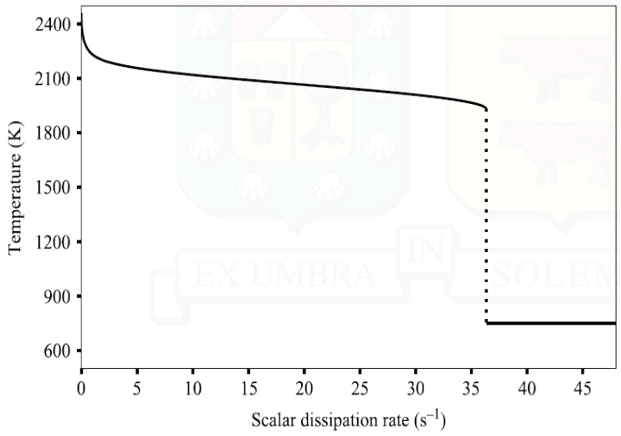
Pierce y Moin (2004) [2] intentan dar un nexo más acabado en la simulación de llamas turbulentas, relacionando la química a un nivel superior en escalas más pequeñas de seguimiento del flujo a través de un enfoque de variable de progreso bajo el concepto de flamelet. En *Large-Eddy Simulation* (LES), las grandes escalas de movimiento que contienen energía se simulan numéricamente, mientras que las pequeñas escalas no resueltas y sus interacciones con las grandes escalas son simplemente modeladas. Las grandes escalas, que suelen controlar el comportamiento y las propiedades estadísticas de un flujo turbulento, tienden a ser dependientes de la geometría y del flujo, mientras que las pequeñas escalas tienden a ser más genéricas y, por consiguiente, más fáciles de modelar. Se ha argumentado que, ya que las reacciones químicas tienen lugar sólo después de que los reactantes se mezclan a nivel molecular (de modo que las reacciones ocurren principalmente en las escalas pequeñas), los flujos de reacción turbulenta no pueden ser globales a nivel de todo el dominio. Aparece el detalle que en los mecanismos cinéticos reales pueden envolver muchas especies y pasos de reacción. Por ende, un término para cada ecuación de transporte debe ser modelado. El coste computacional es levemente mayor para tal formulación.

En este trabajo se compararon tres modelos, uno de química rápida, otro utilizando modelos de llama estable (SFM) y otro con la implementación de la variable de progreso. Además, se comparó con mediciones experimentales. En una comparación entre el SFM y el modelo con variable de progreso, una de las mayores limitaciones del primero es que no es capaz de tomar en cuenta el fenómeno de extinción e ignición (discontinuidad de la Figura 4.1.a). Pierce et al. señalan que la librería está incompleta, porque no puede representar ninguno de los estados intermedios parcialmente extinguidos que debería llenar la brecha entre el punto crítico y la completa extinción de la llama. Por ende, el modelo propuesto de variable de

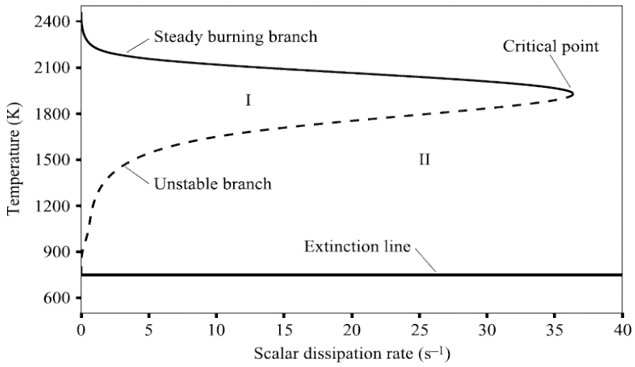
progreso presentó dos ventajas en este nivel:

1. Es capaz de representar estados de llama que están completamente extinguidos. El SFM, para un valor de χ, solo puede representar un estado.

2. El camino que se sigue durante la extinción o la re-ignición en el modelo de variable de progreso es continua (ver la rama inestable de la Figura 4.1.a).



(a) Lugar de máximas temperaturas en SFM.



(b) Lugar de máximas temperaturas en modelo con Y_{PV}.

Figura 4.1: Contraste de la tasa de disipación escalar y la temperatura. Fuente: [2].

En la línea de completa extinción, el efecto de la cinética química es insignificante, de modo que el estado químico es independiente de la velocidad de disipación. Por lo tanto, estados de llama los cuales no se pueden representar en el SFM pueden ser representados por el enfoque de la variable de progreso. Sin embargo, no se puede predecir fehacientemente los fenómenos de ignición y extinción como se muestra en las dos últimas figuras, puesto que estos fenómenos son inherentemente inestables. Entonces, el enfoque de variable de progreso puede proveer una representación más exacta de la extinción y re-ignición que el entregado por el SFM.

En la Figura 4.2.a, la predicción de la llama comienza en una zona más alejada del quemador con respecto a la Figura 4.2.b. Esta última predice de mejor forma el inicio de la llama. Además, el comportamiento

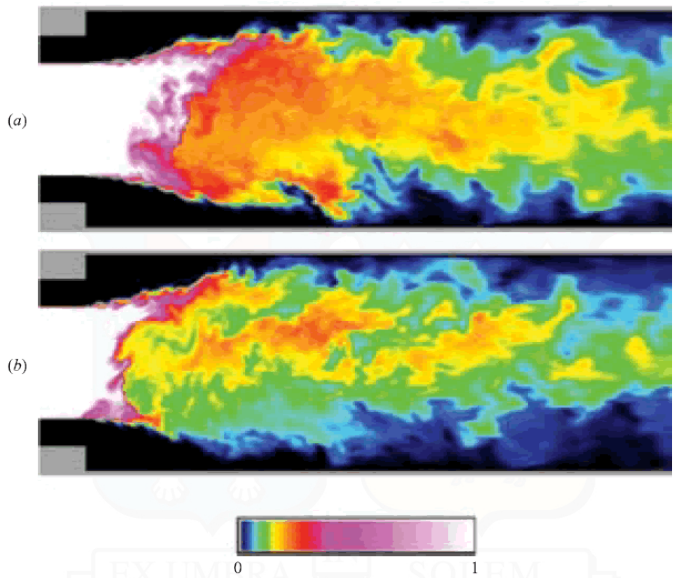


Figura 4.2: Captura de fracción de mezcla para: (a) SFM; (b) Modelo con variable de progreso. Fuente: [2].

de Z es bastante diferente, siendo éste un escalar conservado. Su variación recae en la liberación de calor. La liberación de calor causa dilatación en el flujo dentro de las capas delgadas de mezcla entre el combustible y el oxidante, separándolos cuando se intentan mezclar. Luego, Z decrece cuando hay liberación de calor y, en efecto, puede ser utilizado como indicador de si la locación y la tasa de reacciones químicas está bien predichas por el modelo químico.

En las Figura 4.3 se presentan las producciones en masa de la variable de progreso, captura análoga a la descrita anteriormente. El SFM presenta una llama unida, mientras que la variable de progreso presenta un fenómeno de *lift-off* por un lado, y una unión por el otro. La capacidad de representar el fenómeno suma una nueva ventaja. En la Figura 4.3.b la extinción ocurre en la parte superior, reactantes sin quemar son capaces de penetrar al interior de la llama. Las pequeñas cantidades de producto visible en la región interna del puerto de combustible son debido ocasionalmente a la re-circulación de productos calientes. El SFM predice significativamente menos producción debido al *enfriamiento* que la tasa de disipación escalar tiene sobre la estructura de la llama de difusión (ver Figura 4.3.a). Además, presenta ciertas ondulas, las cuales son defectos (no son físicas), y se deben a fluctuaciones locales en la tasa de disipación en una región en donde hay mezcla de producto y combustible con casi sin reacción (o bien, sin reacción).

En análisis de resultados, el SFM predice una gran formación de productos en las capas delgadas mezcladas cerca de la placa divisora anular, como se esperaría de una llama unida (también se debe a la recirculación de productos, principalmente). En cambio, Y_{PV} se ajusta mucho más a los datos obtenidos de los experimentos. Si bien Pierce y Moin señalan que la producción de contaminantes no es uno de los objetivos de su trabajo, esta información ayuda enormemente a una predicción más exacta en el cálculo de producción de hollín.

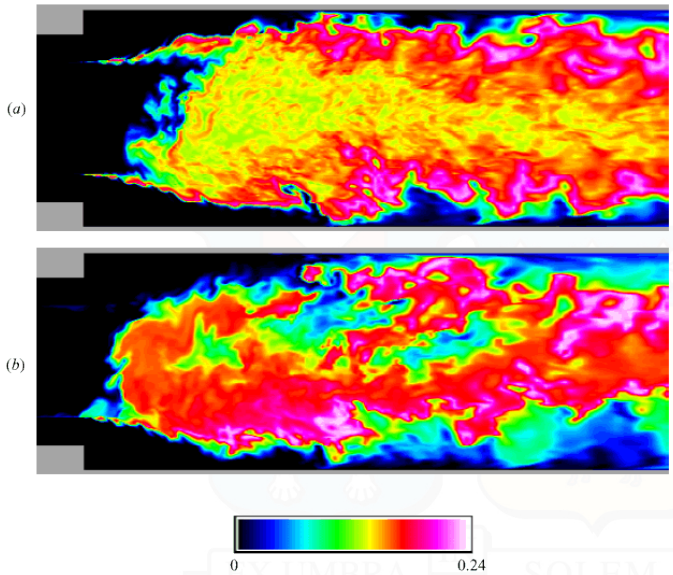


Figura 4.3: Captura de fracción de masa producido (Y_{PV}) para: (a) SFM; (b) modelo con variable de progreso. Fuente: [2].

En cuanto a variables de estado, como la temperatura y la velocidad, el modelo con variable de progreso se adapta eficazmente. Sin embargo, se detecta que en la producción de la especie CO, el SFM supera al de la variable de progreso (existe una sub-predicción en el cálculo de CO por parte de este último modelo). El CO es una especie significativa en la región interior rica en combustible de la llama. Debido a que las tasas de disipación son bajas en esta región, el modelo de flamelet señala las soluciones de cuasi-equilibrio, que tienen bajas temperaturas y altas concentraciones de CO en mezclas ricas en combustible. Esta parte de la librería flamelet no es únicamente explicada por la variable de progreso, de modo que no se puede acceder a tales estados químicos de alto contenido de CO.

Por último, según los autores, una posible mejora es considerar el uso de la entropía como variable de progreso, ya que la entropía siempre aumenta monotónicamente a medida que las reacciones avanzan hacia el equilibrio.

4.2. Hu, Olguín & Gutheil 2017

En el reciente trabajo de Hu et al. (2017) [3], se desarrolló un enfoque de flamelet / variable de progreso para un uso en la combustión por pulverización con combustible líquido parcialmente pre-vaporizado, donde una biblioteca de flamelets laminar de aerosol (o *spray*) representa la evaporación dentro de las estructuras de llama laminar. Para este propósito, la formulación estándar de llama de pulverización para combustible líquido y oxidante de evaporación pura se extiende por una variable de progreso (de reacción química) tanto en el modelo de llama de pulverización turbulenta como en las estructuras de llama laminar de aerosol,

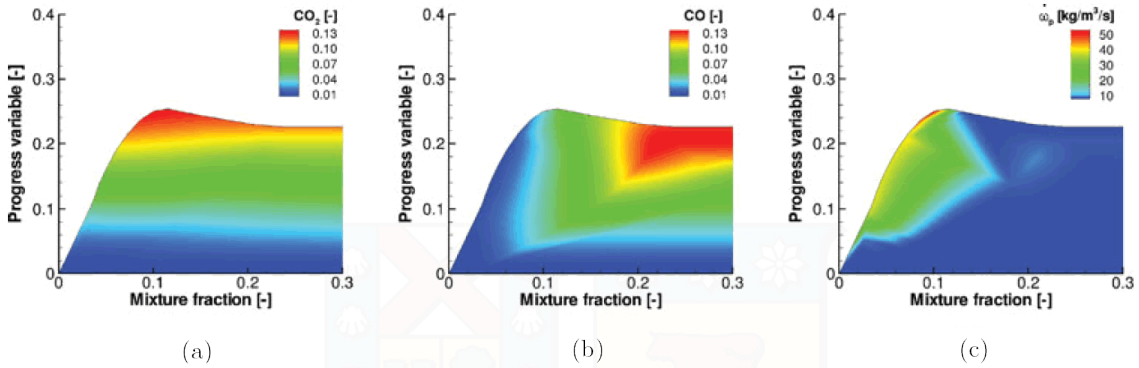


Figura 4.4: Planos de contorno de: (a) fracción de masa de CO_2; (b) fracción de masa de CO; (c) término fuente de reacción química de la variable de progreso en dependencia de la fracción de mezcla y la variable de progreso. Fuente: [3].

para tener en cuenta el efecto del líquido pre-vaporizado combustible. Además, se combina una función de densidad probabilística para simular el transporte turbulento de especies generadas de la llama de aerosol de etanol / aire.

Para esta investigación, solo es de interés las estructuras laminares. Todos los flujos entran a temperatura ambiente de 300 K y a presión atmosférica. Las estructuras de la llama de aerosol son mapeadas dentro de una librería flamelet usando la fracción de mezcla y la variable de progreso de reacción, usando la misma definición formulada en Ec. 2.3 y 2.7, respectivamente. El término fuente químico $\omega_{PV} = \omega_{CO_2} + \omega_{H_2O}$ de la variable de progreso es obtenido desde la librería flamelet.

La Figura 4.4 muestra gráficos de contorno de CO_2 únicamente pues, según los autores, el comportamiento es muy similar entre CO_2 y H_2O. Los mayores valores de formación de CO_2 están dadas en las zonas de estequiometría de la fracción de mezcla. Se indica también que la fracción de masa de CO_2 incrementa a medida que la reacción progresa. A su vez, la Figura 4.4.b muestra que el mayor valor de CO reside en los valores de fracción de mezcla 0.2 y 0.3 (áreas ricas en combustible).

La simulación considerando la variable de progreso muestra un buen rendimiento y proporciona una nueva visión de la estructura local de esta llama de pulverización, ya que permite la contabilización de las reacciones químicas en áreas premezcladas en presencia de evaporación por pulverización.

5 | Análisis de Resultados

Los resultados expuestos son los simulados para una llama de etileno con OI 21 % vía flamelet con el uso de la tasa de disipación escalar y la variable de progreso. En este capítulo se analiza la implementación del modelo con variable de progreso, el cual por simplicidad denominaremos M-Y_{PV}. Se comparará con los resultados obtenidos de la simulación con la tasa de disipación escalar como variable conectora con la base flamelet, cuyo modelo identificaremos como M-χ.

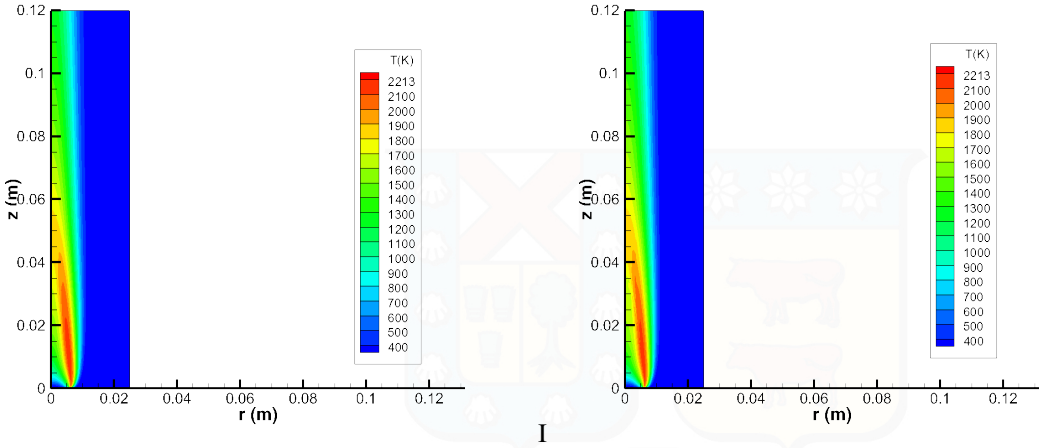
5.1. Campos de la Llama

Los principales campos de llama son presentados en el conjunto de gráficas obtenidas y analizadas con Tecplot, para cuyos casos, la lama se encuentra en una condición activa – estacionaria.

Para el M-Y_{PV}, las Figuras que exponen los campos representativos de la llama, como temperatura, producción de especies mayores y flujo radiativo, todos relacionados entre sí, presentan una leve discontinuidad en el cálculo que es visualmente notorio. Esto se debe al cambio de pendiente que ocurre en los perfiles de la variable de progreso en secciones que circundan la fracción de mezcla estequiométrica, donde los perfiles de temperatura alcanzan los máximos. A modo de respaldar la idea, la tasa de disipación escalar tiene el máximo cuando Z es equidistante del valor 0 y 1. Este cambio de pendiente en el perfil de χ se da en lugares lejanos de la zona de reacción.

5.1.1. Estructura de Llama

La temperatura es la condición física que, junto a la presión, gatilla la ignición de la mezcla y mantiene la llama encendida sin añadir calor exterior, generando la continua reacción gracias a su gradiente. Para M-Y_{PV}, la temperatura máxima es de 2213 K, mientras que la máxima del M-χ es 2159 K. En general, se aprecian temperaturas similares en ambos modelos si es que a los campos de temperatura de la Figura 5.1 se reducen al mismo rango de temperatura. Un cordón de temperatura superior se presenta en el M-Y_{PV} desde el centro del quemador. Las temperaturas máximas se dan a esta curva.

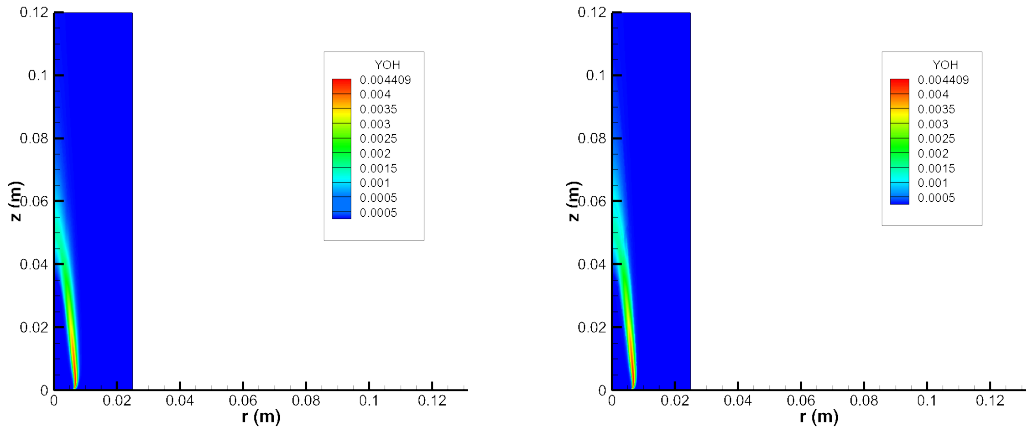


(a) M-χ – Temperatura. **(b)** M-Y_{PV} – Temperatura.

Figura 5.1: Campos de temperatura de la llama para los modelos estudiados. Fuente: Elaboración propia.

La mezcla muestra la difusión del combustible inyectado a través de la entrada del quemador central y del oxidante inyectado por la zona anular que lo circunda. La zona de reacción está caracterizada por zonas de alta temperatura y elevadas concentraciones de radicales OH^-. El efecto de que el particulado se consuma viene explicado por la oxidación, rol importante que juega la vigencia del grupo hidroxilo OH^-, el cual oxida la partícula de hollín.

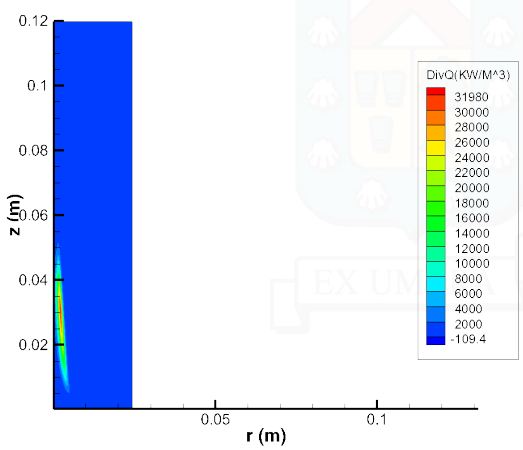
Como se aprecia en la Figura 5.2, la producción de OH^- en ambos métodos es similar, lo que explicaría una altura de llama similar y re-afirma que la diferencia de temperatura recae en las variables de transporte. La generación del hollín describe el comportamiento de la divergencia del flujo de calor radiativo [47], tal como se aprecia en la Figura 5.3.a y 5.3.b presentadas más adelante.



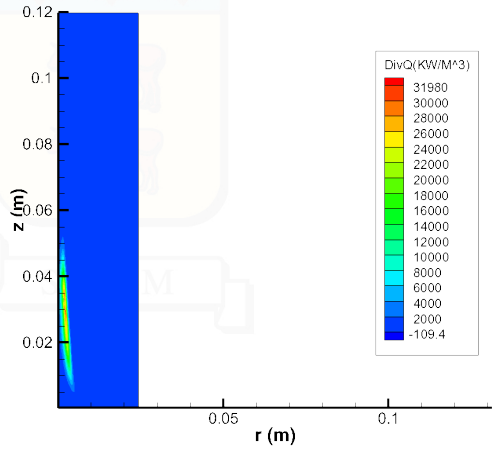
(a) M-χ: OH^- producido. **(b)** M-Y_{PV}: OH^- producido.

Figura 5.2: Fracción de hidroxilo producido. Fuente: Elaboración propia.

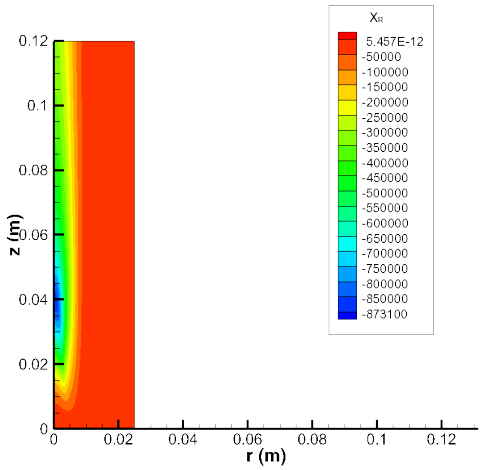
Por lo tanto, la producción de hollín está por sobre las zonas de alta concentración de acetileno (C_2H_2), que resulta ser el principal precursor, y por debajo de la zona de reacción. Luego, se concluye que está siendo completamente oxidado por las altas concentraciones del grupo hidroxilo. Es así como la llama se encuentra bajo el SP.



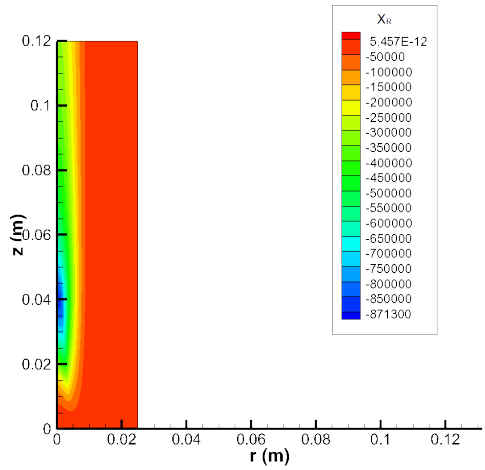
(a) M-χ: Divergencia del flujo radiativo volumétrico.



(b) M-Y_{PV}: Divergencia del flujo radiativo volumétrico.



(c) M-χ: Defecto de entalpía.



(d) M-Y_{PV}: Defecto de entalpía.

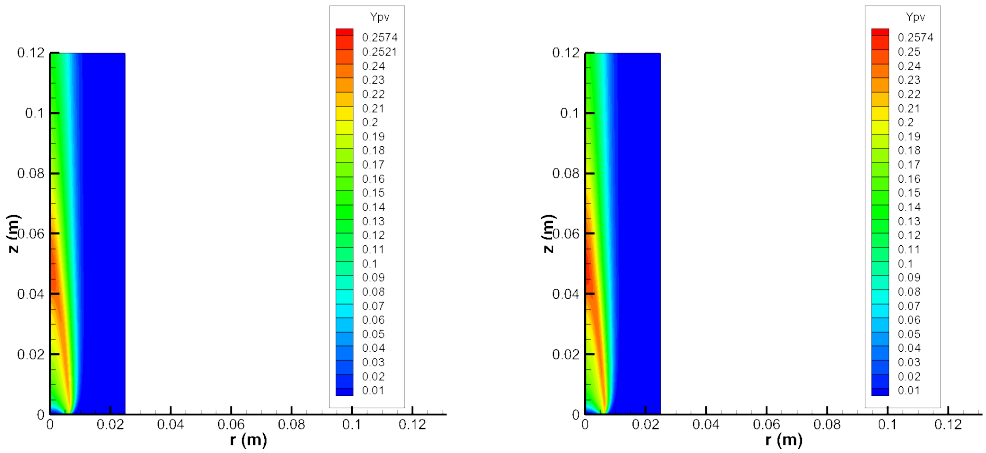
Figura 5.3: Campos asociados a radiación y liberación de energía. Fuente: Elaboración propia.

Observando la Figura 5.3, como los cálculos de transferencia de calor por defecto de entalpía y divergencia de la radiación volumétrica son similares, es esperable que la fracción de mezcla no varíe, tal como ocurrió. Por otro lado, la nula diferencia entre los modelos para estos campos hace suponer que la diferencia de temperatura se debe al transporte de especies, teniendo en cuenta que la fracción de mezcla decrece al haber mayor liberación de calor. Por otro lado, el parecido del contraste viene co-relacionado con la altura de llama, puesto a que si llegara a disminuir su valor, se reduciría la pérdida de radiación [1].

5.1.2. Producción de Especies

La producción de especies es lo que más interesa en cuanto a contraste de enfoques, puesto que explican el origen del hollín, desde su formación hasta el fin de su existencia (de no ser liberado como contaminante).

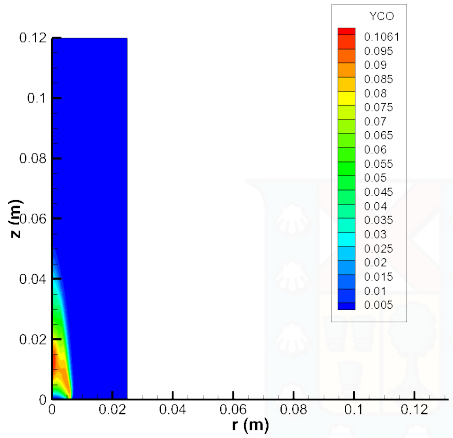
La producción de H_2O proporcionada por el M-Y_{PV} es superior a la del M-χ. Las altas temperaturas registradas por este modelo implementado disminuyen la velocidad de difusión presente en la ecuación de conservación de especie del H_2O, tal como se puede apreciar en la Ec. 3.10), cuya densidad es menor a la del CO_2, viéndose más afectada ante este cambio de temperatura. De hecho, el valor máximo registrado en la producción de CO_2 es igual a 0.1766 en ambos modelos. Por otro lado, tal como se puede observar en las Figuras 5.4, los campos de llama de H_2O y CO_2 influyen directamente en el flujo radiativo y su aporte energético al sistema en una llama de difusión.



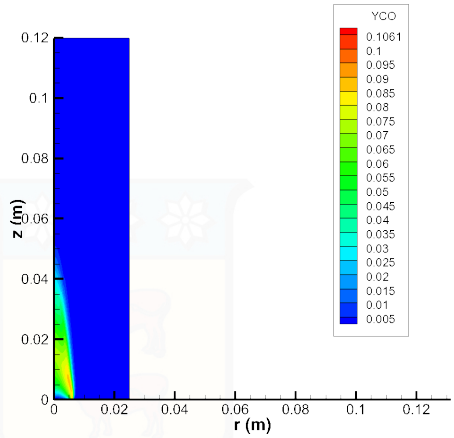
(a) M-χ: Y_{PV} producido. **(b)** M-Y_{PV}: Y_{PV} producido.

Figura 5.4: Fracciones en masa de variable de progreso producidas. Fuente: Elaboración propia.

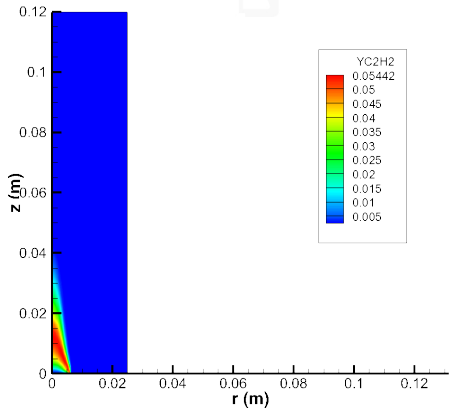
Por su parte, el C_6H_6 y el C_2H_2 son sub-dimensionados por el M-Y_{PV} según el conjunto de Figuras 5.5. Estas especies son importantes en la región rica en combustible de la llama. Debido a que las tasas de disipación son bajas en esta región por parte de la variable de progreso, el modelo flamelet señala soluciones de bajas temperaturas y altas concentraciones en mezclas ricas en combustible, tal como se indicó en la Sección 4 [2]. De esta manera, el ascenso por el perfil viene dado desde la derecha hacia la izquierda. Como la pendiente en ascenso en el perfil de χ es mayor, mayor temperatura registra (la interpolación se da entre perfiles de temperatura de mayor rango).



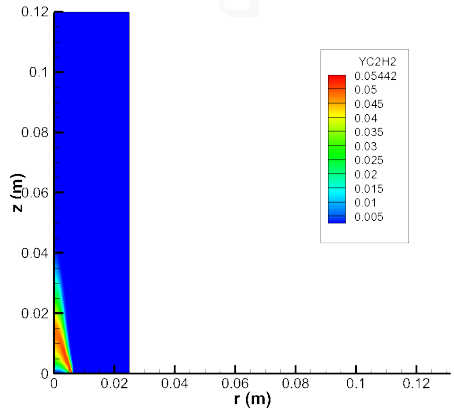
(a) M-χ: CO producido.



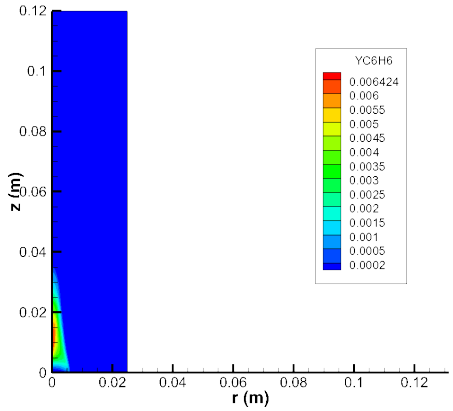
(b) M-Y_{PV}: CO producido..



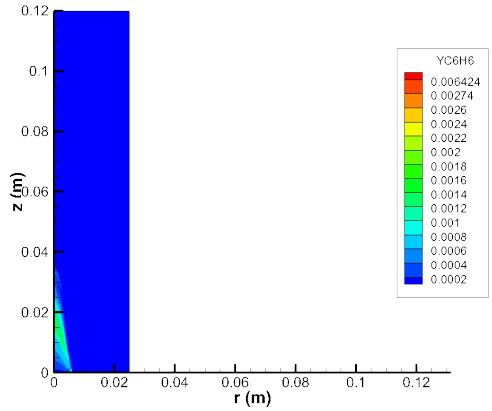
(c) M-χ: C_2H_2 producido.



(d) M-Y_{PV}: C_2H_2 producido.



(e) M-χ: C_6H_6 producido.



(f) M-Y_{PV}: C_6H_6 producido.

Figura 5.5: Fracciones en masa de CO, C_2H_2 y C_6H_6. Fuente: Elaboración propia.

5.1.3. Interpolación

Se compararon los métodos de interpolación para ambos métodos. La variable de progreso, a nivel de código, reemplazó a la tasa de disipación escalar y se le asignó el mismo nombre debido a las múltiples consultas en las diferentes subrutinas del CFD. Las distribuciones, dadas por los archivos NINTS, son iguales, excepto para la tasa de disipación escalar, como se esperaba.

El M-χ describe χ exactamente como la teoría lo indica, realizando mayor número de consultas por la zona exterior de la llama, donde el etileno prima. El transporte, que depende de Z, describe un asenso hasta el final de la llama. Por su parte, el M-Y_{PV} describe menores tasas de disipación escalar precisamente donde M-χ describe mayores. Esto ocurre porque los perfiles de la variable de progreso se encuentran en la línea de la estequiometría, justo en el eje z de la llama simulada. Al generar obtener mayores temperaturas de la librería, menores tasas de disipación escalar se rescatan, lo que provoca un sub-dimensionamiento de las fracciones en masa de las especies menores. De hecho, a medida que el eje radial crece o decrece respecto de la boquilla, el χ calculado por el M-Y_{PV} aumenta de manera simétrica.

Finalmente, las líneas presentadas en las zonas más calientes de la llama, describen el Z_{st} de la librería, donde el punto de inflexión dado por el máximo del perfil de Y_{PV} genera puntos erróneos en el cálculo numérico. Para mejorar esta característica, un método numérico de normalización de la variable de progreso o de suavizamiento, podría minimizar la línea de inflexión. En un caso ideal, que el perfil sea una función inyectiva (sin cambio de pendiente), haría que el campo de temperatura, por ejemplo, fuese completamente continuo. Una variable de progreso monotónicamente creciente daría mejores resultados (esta es la ventaja que tiene χ como variable de consulta en el M-χ, pues está en función de la fracción de mezcla Z, tal como se puede ver en la la Ec. 2.5). Pierce et al. [2] han propuesto la entropía como variable de progreso ideal en una llama turbulenta, ya que una llama turbulenta pasa de un estado laminar a uno turbulento y *desordenado*. Sin embargo, cuando la llama difunde de manera lineal, la entropía no sería una buena variable de control. Para ello, una variable de progreso compuesta de otras especies y que varíe por tramos podría dar resultados aún más favorables.

6 | Conclusiones y Perspectivas

El trabajo de investigación fue realizado con el fin de implementar un método de consulta alternativo independiente de la fracción de mezcla como eje rotulador del proceso de combustión. Una tasa de transporte difusivo fue reemplazado por una variable de producción de especies mayores o significativas, como es el agua y el dióxido de carbono, en el proceso de combustión. Todo esto, porque cálculos numéricos en esta línea juegan de antesala a la aplicación de modelos de formación, ciclo de vida y cálculo asociado al hollín. Ser precisos en su conocimiento significa desarrollar herramientas para poder controlarlo.

Se utilizó el concepto de flamelet para el cálculo rápido de simulación en una llama de etileno con aire con 21 % de oxígeno. Con reacciones químicas rápidas se puede considerar que se alcanza el equilibrio químico en cualquier punto y por lo tanto se conocen las sustancias que van a existir y en qué proporciones. La composición química solo varía si cambian las condiciones externas como la presión, temperatura y fracciones másicas iniciales. Para demostrar la eficacia de la implementación de la variable de progreso, se comparó el resultado de producción con los entregados por el método basado en la tasa de disipación escalar, el cual deriva de la fracción de mezcla. El seguimiento del progreso del hollín resulta razonablemente bien para el M-Y_{PV}. Los resultados son similares en producción de especies mayores (excepto para el CO) y especies oxidativas. El resultado de éste punto da señales de que el cambio de temperatura se podría deber al consultar la química almacenada en la librería flamelet desde la producción de especies mayores sobre-dimensionadas por la temperatura. No obstante, tanto la radiación calculada de la divergencia y la diferencia de entalpías es similar en ambos modelos, lo que indicaría que el fenómeno de transporte dado por χ es el responsable. En el M-Y_{PV} la especie CO, que prima en la zona de combustible (cercanos a $Z = 1$) donde las tasas de disipación son bajas, el resultado es sub-dimensionado. A la vez, los resultados de C_2H_2 y C_6H_6 son interesantes. La menor producción reflejada en los resultados del M-Y_{PV} señalan que se deben hacer pruebas más profundas en esta altura de la llama.

La concentración de especies menores es mayor para el M-χ, pues la zona de residencia se da sobre la inyección de combustible, que al registrar un campo de temperatura menor, χ adquiere un bajo valor, por lo que el transporte es lento. Al contrario, en el M-Y_{PV}, si bien las temperaturas son altas (y por ende, el perfil de χ disminuye en valor), existen más factores que entran en juego (de acuerdo a las ecuaciones de energía

y conservación de especies). Como esta información no es exclusiva de Y_{PV}, resulta difícil interpretar este resultado.

En base al punto anterior, resulta importante analizar para diferentes OI % cómo el contraste de estos modelos va cambiando; en un sentido descendente de índices de oxígeno, según los estudios de Escudero et al. [1] sería probable generar *lift-off* en la llama; por otro lado, para índices superiores es posible que, ya que la oxidación se da desde la boquilla del quemado, las altas temperaturas sobre-dimensionen las producciones de las especies mayores que conforman la variable de progreso y, tal vez, otras especies tenderían a representar mejor la combustión, es decir, la variable de progreso no sería necesariamente la suma de las fracciones en masa de agua y dióxido de carbono. El trabajo mencionado de Escudero et al. resulta propicio para expandir el trabajo en esta línea investigativa.

Posibles nuevos trabajos:

- Crear nuevas librerías de flamelet para diferentes índices de oxígeno y examinar el cambio.
- Estudiar nuevas configuraciones de Y_{PV}.
- Normalizar la variable de progreso para dar suavidad al perfil.
- Estudiar una variable de progreso que sea monotónicamente creciente (inyectiva).
- Ampliar la precisión del mallado para las zonas de mayor iteración.

Por último, se vuelve a mencionar que este trabajo entrega una amplitud en el modelo de llama a través de un conjunto de múltiples variables que se relacionan para seguir de mejor manera el progreso de la combustión. Modelos numéricos asociados a la predicción del hollín se ven favorecidos. Este conocimiento agregado permite a los investigadores extender la conceptualización de una llama de difusión coflujo y lograr realizar una mejor lectura a partir de los gases emanados y energía entregada por ella.

Bibliografía

[1] F. Escudero, A. Fuentes, J.L. Consalvi, F. Liu, and R. Demarco. Unified behavior of soot production and radiative heat transfer in ethylene, propane and butane axisymmetric laminar diffusion flames at different oxygen indices. *Fuel*, 183:668–679, 2016. (document), 1.1, 2.8, 3.3.1, 5.1.1, 6

[2] C. Pierce and P. Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 504:73–97, 2004. (document), 1.1, 2.6.1, 2.6.1.3, 2.7, 2.7, 4.1, 4.1, 4.2, 4.3, 5.1.2, 5.1.3

[3] Y. Hu, H. Olguín, and E. Gutheil. A spray flamelet/progress variable approach combined with a transported joint pdf model for turbulent spray flames. *Combustion Theory and Modelling*, 21:575–602, 2017. (document), 1.3, 2.6.1, 2.7, 4.2, 4.4

[4] M. Energía. Antecedentes sobre la matriz energética en chile y sus desafíos para el futuro. 2011. (document), 2.1, 2.2

[5] A. Gómez-Barea and B Leckner. Modeling of biomass gasification in fluidized bed. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(4):444–509, 2010. (document), 2.2

[6] J. Pino, J. Cuevas, F. Escudero, P. Reszka, and A. Fuentes. Soot propensity detection by eulerian video magnification. *Proc 2017 IEEE International Instrumentation and Measurement Technology Conference*, 2017. (document), 2.3, 2.4.2, 3.3.1

[7] S. Izvekov and A. Violi. A coarse-grained molecular dynamics study of carbon nanoparticle aggregation. *Journal of chemical theory and computation*, 3(2):504–512, 2006. (document), 2.4

[8] R. Demarco. *Modelling thermal radiation and soot formation in bouyant diffusion flames*. PhD thesis, Aix-Marseille Universié, Marseilles, 2012. (document), 2.3, 2.4.2, 2.5, 2.5, 2.8

[9] Ö. Gülder. Effects of oxygen on soot formation in methane, propane, and n-butane diffusion flames. *Combustion and Flame*, 3(101):302–310, 1995. (document), 2.6, 2.6

[10] R. Kee, F. Rupley, J. Miller, and M. Coltrin. Oppdif: A fortran program for computing opposed flow diffusion flames. *Technical report*, 1997. (document), 2.5, 3.2, 3.1, 3.2, 3.2.1, 3.1

[11] R. Kerr. Soot is warming the world even more than thought. *Progress in Energy and Combustion Science*, 339(6118):382, 2013. 1.1

[12] J. Quaas. Soot is warming the world even more than thought. *Global warming: The soot factor*, 471(7339):456–457, 2011. 1.1

[13] D. Green and R. Lewis. The effects of soot-contaminated engine oil on wear and friction: a review. *Journal of Automobile Engineering*, 222(9):1669–1689, 2008. 1.1

[14] B. Frank, M. Schuster, R. Schlögl, and D. Su. Emission of highly activated soot particulate - the other side of the coin with modern diesel engines. 52:2673–2677, 03 2013. 1.1

[15] M. Smooke, M. Long, B. Connelly, M. Colket, and R. Hall. Soot formation in laminar diffusion flames. *Combustion and Flame*, 143(4):613–628, 2005. 1.1

[16] J.L. Consalvi, R. Demarco, A. Fuentes, S. Melli, and J.P. Vantelon. On the modelling of radiative heat transfer in laboratory scale pool fires. *Fire Safety Journal*, 2012. 1.1

[17] N. Caetano, F. Pereira, H. Vielmo, and F. Van Der Lann. Experimental study of soot volume fraction applied in laminar diffusion flames. *Modern Mechanical Engineering*, 3(4):137–141, 2013. 1.1

[18] A. Attili, F. Bisetti, M. E. Mueller, and H. Pitsch. Formation, growth, and transport of soot in a three-dimensional turbulent non-premixed jet flame. *Combustion and Flame*, 161(7):1849–1865, 2014. 1.1

[19] I. Glassman and P. Yaccarino. The effect of oxygen concentration on sooting diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, 24(3-4):107–114, 1980. 1.1

[20] B. Leonard and J. Drummond. A modelling study of aromatic soot precursors formation in laminar methane and ethene flames. *Combustion and Flame*, 156(9):1705–1722, 2009. 1.1

[21] D. Carbonell, C. D. Perez-Segarra, P. J. Coelho, and A. Oliva. Flamelet mathematical models for non-premixed laminar combustion. *Combustion and Flame*, 156(2):334–347, 2009. 1.3, 2.6, 2.6.1, 2.6.1.3, 2.6.1.3, 3.1

[22] World Health Organization. Fuel for life: household energy and health. *Global update 2005: Summary of risk assessment*, page 42, 2006. 2.1.1

[23] World Health Organization. Addressing the links between indoor air pollution, household energy and human health. *Report from Washington consultation*, page 56, 2000. 2.1.1

[24] J. Lahaye and G. Prado. Morphology and internal structure of soot and carbon blacks. *Particulate Carbon*, pages 33–55, 1981. 2.4

[25] I. Kennedy. Models of soot formation and oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(2):95–132, 1997. 2.4

[26] J.F. Sacadura. Radiative heat transfer in fire safety science. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 93(1):5–24, 2005. 2.4

[27] R. Viskanta. Overview of some radiative transfer issues in simulation of unwanted fires. *International Journal of Thermal Sciences*, 47(12):1563–1570, 2008. 2.4

[28] A. Fuentes, R. Henríquez, F. Nmira, F. Liu, and J.L. Consalvi. Experimental and numerical study of the effects of the oxygen index on the radiation characteristics of laminar coflow diffusion flames. *Combustion and flame*, 160(4):786–795, 2013. 2.4

[29] Q. Zhang. Detailed modeling of soot formation/oxidation in lamiar coflow diffusion flames. *PhD thesis, Graduate Department of Mechanical and Industrial Engineering, University of Toronto*, 2009. 2.4.1, 2.4.2

[30] H. Michelsen. Probing soot formation, chemical and physical evolution, and oxidation: A review of in situ diagnostic techniques and needs. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. 2.4.1

[31] H. Palmer and C. Cullis. Chemistry and physics of carbon. *ed. PL Walker, Jr., Marcel-Dekkerinc., New York*, pages 265–325, 1965. 2.4.1

[32] R. Dobbins and C. Megaridis. Morphology of flame-generated soot as determined by thermophoretic sampling. *Langmuir*, 3(2):254–259, 1987. 2.4.1

[33] B. Haynes and H. Wagner. Soot formation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 7(4):229–273, 1981. 2.4.2

[34] M. Frenklach, D. Clary, W. Gardiner, and S. Stein. Detailed kinetic modeling of soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 20, pages 887–901. Elsevier, 1985. 2.4.2

[35] A. Jocher, J. Bonnety, H. Pitsch, T. Gomez, and G. Legros. Dual magnetic effects on soot production in partially premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. 2.5

[36] F. Carbone, K. Gleason, and A. Gomez. Pressure effects on incipiently sooting partially premixed counterflow flames of ethylene. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. 2.5

[37] B. Chen, X. Liu, H. Liu, H. Wang, D. Kyritsis, and M. Yao. Soot reduction effects of the addition of four butanol isomers on partially premixed flames of diesel surrogates. *Combustion and Flame*, 177:123–136, 2017. 2.5

[38] F. Egolfopoulos, H. Zhang, and Z Zhang. Wall effects on the propagation and extinction of steady, strained, laminar premixed flames. *Combustion and Flame*, 109(1):237–252, 1997. 2.6

[39] R. Santoro, H. Semerjian, and R. Dobbins. Soot particle measurements in diffusion flames. *Combustion and Flame*, 51:203–218, 1983. 2.6

[40] N. Peters. Turbulent combustion. 2000. 2.6.1

[41] Y. Chen, C. Chang, K.L. Pan, and J.T. Yang. Flame lift-off and stabilization mechanisms of nonpremixed jet flames on a bluff-body burner. *Combustion and flame*, 115(1):51–65, 1998. 2.7

[42] N. Peters and F. Williams. Lift-off characteristics of turbulent jet diffusion flames. *AIAA journal*, 21(3):423–429, 1983. 2.7

[43] Z. Qin, V. Lissianski, V. Yang, W. Gardiner, S. Davis, and H. Wang. Combustion chemestry of propane: A study of detailed reaction mechanims optimization. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28:1663–1669, 2000. 3

[44] Th. Van Karman. Acerca de la fricción laminar y turbulenta. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1(4):233—-252, 1921. 3.1

[45] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10:319–339, 1984. 3.2.1

[46] A. Cook, J. Riley, and G. Kosály. A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows. *Combustion and Flame*, 109:332–341, 1997. 3.2.1

[47] J.P. Soussi. *Estudio numérico de llamas de difusión de propano a diferentes índices de oxígeno*. PhD thesis, Departamento de Industrias, Universidad Técnica Federico Santa María, Mayo 2017. 3.2.1, 3.2.2, 5.1.1

[48] Ö. Gülder, D. Snelling, and R. Sawchuk. Influence of hydrogen addition to fuel on temperature field and soot formation in diffusion flames. *Combustion and Flame*, 8(26):2351–2358, 1996. 3.3.1