UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA

FACULTAD DE INGENIERIA

DEPARTAMENTO DE MECANICA

USM. BIBLIOTECA CENTRAL
3560900220629

MODELACION NUMERICA DE LA COMBUSTION DE CARBON PULVERIZADO

OBTENCION DE CAMPOS TERMICO Y RADIATIVO

18/12/89

Memoria para optar al título de:

Ingeniero Civil Mecánico

Autor : Carlos Rosales Huerta.

Profesor Guía : Ph. D. Fernando Carvajal G.
Profesor Correferente : Dr. Ing. Alejandro Sáez C.

-1989-

UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA
BIBLIOTECA CENTRAL
Inventario: M 92 M6 c2

Soli Deo Gloria

A mis queridos padres

RESUMEN

Este trabajo tiene como fin incorporar a la modelación numérica de la combustión de carbón pulverizado, desarrollada en el Depto. de Mecánica UTFSM, la resolución de los campos térmico y radiativo en el interior de la cámara de combustión. Para ésta se adopta una geometría cilíndrica y los campos de las diversas variables involucradas se consideran axisimétricos. Todas las variables asociadas a la fase gaseosa se resuelven según un punto de vista euleriano, mediante diferencias finitas, empleándose para las ecuaciones y malla de discretización el enfoque de volumen de control. Las trayectorias de las partículas se hallan resueltas según un enfoque lagrangiano.

Para el acoplamiento de la ecuación de energía se estudian dos alternativas. La primera es resolver dicha ecuación con linealización del término fuente, en forma análoga a las ecuaciones ya incluidas en la modelación, usando el método línea a línea y el TDMA. Este procedimiento demuestra ser divergente, por lo que la ecuación de energía se acopla finalmente resolviéndola simultáneamente con las ecuaciones de conservación de especies químicas, en sus formas no-lineales. Para esto se emplea el método de Newton-Raphson en combinación con un método de gradiente.

El campo radiativo es resuelto por medio del método de 4 flujos, en el que se incluye la anisotropía de la dispersión de radiación, provocada por las partículas de carbón, empleando la función de fase para reflexión difusa sobre partículas esféricas.

Se incluyen, además, algunas consideraciones teóricas sobre la formación de especies polutantes en combustión de carbón pulverizado.

Finalmente se concluye que los resultados obtenidos de la simulación muestran, en general, un comportamiento satisfactorio, aunque se hace necesario un mecanismo mejorado de combustión homogénea.

INDICE

pág.

1. INTRODUCCION.....1

2. MOVIMIENTO DE LA FASE GASEOSA Y PARTICULAS DE CARBON.....2
2.1 Campo de flujo.....2
2.2 Movimiento de las partículas.....4

3. ECUACIONES TERMOQUIMICAS.....8
3.1 Ecuación de energía del gas.....8
3.2 Ecuaciones de conservación de especies químicas.....10
3.3 Combustión homogénea.....11
3.4 Comentario.....15
3.5 Densidad del gas.....17
3.6 Disipación viscosa.....17
3.7 Absorción de radiación.....18
3.8 Fuentes debido a las partículas.....19
3.8.1 Transferencia de masa.....19
3.8.2 Fuente de energía.....22
3.8.3 Fuentes de especies.....24
3.9 Ecuación de energía de las partículas.....25

4. ESPECIES POLUTANTES.....28
4.1 Polutantes nitrogenados.....28
4.1.1 NO térmico y NO inducido.....28
4.1.2 NO del carbón.....30
4.2 Polutantes Sulfurados.....34
4.3 Hollín.....35
4.4 Polutantes inorgánicos.....37

5. SOLUCION DE LAS ECUACIONES TERMOQUIMICAS.....39
5.1 Introducción.....39
5.2 Discretización de las ecuaciones.....40
5.3 Solución como ecuaciones linealizadas.....43
5.4 Resolución simultánea punto a punto.....46
5.4.1 Funcionales de especies.....48
5.4.2 Funcional de energía.....48
5.4.3 Método de solución.....49

5.5 Comentarios....55
5.6 Condiciones de contorno....57
5.7 Disipación viscosa en las paredes....59

6. RADIACION....61
6.1 Ecuación de transferencia radiativa....61
6.2 Dispersión....62
6.2.1 Tipo de dispersión....63
6.2.2 Función de fase....64
6.2.3 Coeficiente de dispersión....65
6.3 Absorción....66
6.4 Temperatura de equilibrio....67
6.5 Solución de la ecuación de transferencia radiativa....68
6.5.1 Método de flujos....68
6.5.2 Modelación de dispersión anisotrópica....70
6.5.3 Ecuaciones discretizadas....72
6.5.4 Condiciones de contorno....72
6.6 Fuentes radiativas....76

7. PROGRAMA COMPUTACIONAL....77
7.1 Subrutinas....77
7.2 Flujograma principal....79

8. RESULTADOS....82
8.1 Campo de flujo....83
8.2 Variables termoquímicas....92
8.3 Campo radiativo....101
8.4 Partículas....104

9. CONCLUSIONES....111

NOMENCLATURA....114

REFERENCIAS....119

ANEXO A : ANALISIS DE LA INFLUENCIA DE LAS FUERZAS DE FLOTACION....125
ANEXO B : METODOS DE NEWTON-RAPHSON Y GRADIENTE....126

ANEXO C : DETERMINACION DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE LOS FUNCIONALES TERMOQUIMICOS.....129
ANEXO D : FUNCIONES DE PARED.....136
ANEXO E : ECUACION PARA LA TEMPERATURA DE PARED.....140
ANEXO F : ECUACION PARA LA DISIPACION VISCOSA EN LA REGION PROXIMA A UNA PARED.....142
ANEXO G : FUNCION DE FASE PARA DISPERSION POR REFLEXION DIFUSA SOBRE PARTICULAS ESFERICAS.....144
ANEXO H : OBTENCION DE FRACCIONES DE DISPERSION ANISOTROPICA.....147
ANEXO I : DESARROLLO DEL METODO DE 4 FLUJOS.....150
ANEXO J : DISCRETIZACION DE LAS ECUACIONES DEL MODELO DE 4 FLUJOS.....154
ANEXO K : FORMULACION ALTERNATIVA DE CONDICIONES DE CONTORNO PARA EL CAMPO RADIATIVO.....156

1. INTRODUCCION

En los últimos años se han llevado a cabo, por parte del Area de Procesos Térmicos del Departamento de Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa María, numerosas investigaciones sobre la combustión de carbón pulverizado, en el marco del proyecto de investigación "Estudio de Combustibles, Procesos de Combustión y Generación en Aplicaciones Nacionales". Dentro de tales investigaciones se ha desarrollado la modelación numérica del proceso, la cual pretende predecir, para una cámara de combustión de geometría conocida y condiciones de entrada de aire y carbón dadas, las variables principales que describen el fenómeno en estado estacionario.

En una primera etapa se desarrolló la modelación en frío (C. Meneveau[7], 1985), obteniéndose los campos de flujo y presión del gas, y las trayectorias y velocidades de las partículas de carbón para una cámara isotérmica. Posteriormente se incluyó la modelación de la combustión homogénea del gas y de la pirólisis y combustión heterogénea de las partículas para un campo de temperatura supuesto (H. Osorio[9], 1988), lo que permite conocer las distribuciones de concentración de especies químicas en el interior de la cámara de combustión, propiedades del gas y parámetros de interés en la combustión de las partículas (decaimiento másico, diámetro, tiempo de quemado, etc). El presente trabajo constituye la continuación lógica de lo anterior y su objetivo básico es incorporar a la modelación la resolución del campo de temperatura del gas y del campo de radiación térmica que se establece en el combustor por los efectos radiativos combinados de las partículas y el gas. Adicionalmente se estudian los fundamentos téoricos sobre la formación de especies polutantes como un primer paso hacia la futura modelación de dicho proceso. El simulador supone una cámara de combustión cilíndrica, forma usual para pequeñas y medianas potencias y hornos experimentales, de modo que los campos de las diferentes variables modeladas pueden considerarse axisimétricos y, por lo tanto, bidimensionales. Por lo mismo las ecuaciones que determinan tales variables se formulan en coordenadas cilíndricas.

Por ser este trabajo continuación de otros anteriores, muchos de los tópicos relevantes en la modelación ya han sido tratados extensamente en aquéllos, por lo que algunos se omiten o bien se tratan en forma muy resumida para permitir la comprensión del contexto global en el cual se inserta el aspecto parcial aquí abordado.

2. MOVIMIENTO DE LA FASE GASEOSA Y PARTICULAS DE CARBON

En lo que sigue se presentan los aspectos fundamentales relativos a la modelación del campo de flujo y el movimiento de las partículas de carbón dentro de la fase gaseosa. Según lo anterior, esto forma parte de etapas anteriores en el desarrollo del modelo, por lo cual se entregará una descripción breve. El tema se analiza en detalle en la ref. [7].

2.1. Campo de Flujo

La modelación del campo de flujo de la fase gaseosa se basa en la solución de la ecuación de conservación del momentum. Se ha despreciado el efecto de la fuerza de gravedad en vista de los elevados números de Reynolds que se dan en flujos de este tipo. No se consideró tampoco el empuje por diferencias de densidad y temperaturas dado que el desarrollo original se efectuó para un caso isotérmico. Para el presente trabajo tal condición no se da, pero puede demostrarse que el efecto del empuje no difiere cuantitativamente en forma significativa del de la gravedad (anexo A), por lo cual, si este último resulta despreciable, el primero también lo es. De este modo sigue siendo válida la consideración de que el flujo es axisimétrico, con lo que las ecuaciones que expresan la conservación del momentum para los tres componentes escalares en coordenadas cilíndricas pueden escribirse como (ecuaciones de Navier-Stokes, forma conservativa, estado estacionario)[7]:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vu) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu r\frac{\partial u}{\partial r}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu r\frac{\partial v}{\partial x}\right) + f_x \qquad (2.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v^2) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu r\frac{\partial v}{\partial r}\right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\rho w^2}{r} - 2\frac{\mu v}{r^2} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu r\frac{\partial v}{\partial r}\right) + f_r \qquad (2.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uw) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vw) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial w}{\partial x}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu r\frac{\partial w}{\partial r}\right) = -\frac{\rho vw}{r} - \frac{w}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r\mu) + f_\theta \qquad (2.1c)$$

Estas son ecuaciones "laminares". Para tomar en cuenta la influencia de las fluctuaciones turbulentas (reflejada en los esfuerzos de Reynolds) se suma a la viscosidad laminar la viscosidad efectiva turbulenta de Boussinesq:

$$\mu_{eff} = \mu_l + \mu_t \tag{2.2}$$

calculándose μ_t según la relación de Prandtl-Kolmogorov:

$$\mu_t = \rho\ C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2.3}$$

donde k es la energía cinética turbulenta, ε la razón de disipación viscosa de k y C_μ una constante empírica (véase tabla 5.1). Esto implica resolver dos ecuaciones de transporte adicionales para k y ε (modelo de turbulencia k-ε):

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u k) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v k) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial r}\right) = G - C_D\rho\varepsilon \tag{2.4a}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \varepsilon) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v \varepsilon) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial r}\right) = \frac{1}{k}(C_1\varepsilon G - C_2\rho\varepsilon^2) \tag{2.4b}$$

siendo G la producción de energía cinética turbulenta:

$$G = \mu_{eff}\left\{2\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{v}{r}\right)^2\right] + \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 + \left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right)\right]^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2\right\} \tag{2.5}$$

σ_k y σ_ε son " números de Prandlt turbulentos" para k y ε respectivamente. Estos y las constantes C_D, C_1 y C_2 se dan en tabla 5.1.

La solución del campo de flujo debe cumplir además con la conservación de masa, expresada en la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v) = {}_pS^m \tag{2.6}$$

con ${}_pS^m$ la fuente másica debido a la transferencia de masa de las partículas al gas.

Resolver las ecuaciones (2.1) requiere conocer el campo de presión. Ya que no se tiene una ecuación explícita para la presión se hace uso del algoritmo SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations). Este consiste básicamente[7,22] en suponer un campo de presión estimativo y obtener con él velocidades u y v mediante las ecuaciones de Navier-Stokes. Estas velocidades estimativas se usan luego para obtener un campo de corrección de presión, el que sumado al anterior entrega un campo de presión mejorado. La corrección de presión permite también calcular términos de corrección para u y v de modo que cumplan continuidad. Con p, u y v corregidos se resuelven las ecuaciones (2.1c) , (2.4) para las variables w, k y ε, y el proceso es iterado tomando p corregido como estimación inicial hasta lograr convergencia.

- Comentario:

Mientras que el modelo k-ε ha demostrado ser satisfactorio para flujos incompresibles sin reacciones, su aplicación a flujos reactivos como el que aquí interesa ha estado más limitada. Algunos autores[2] han demostrado que las ecuaciones de transporte para k y ε deberían incluir términos adicionales para la contribución a G y ε asociada al calor de reacción. No se contempla dentro de los objetivos de este trabajo una revisión del modelo de turbulencia, por lo que hay que tener en cuenta que los resultados que entrega no pretenden dar una descripción precisa del fenómeno. Por lo demás, k-ε sigue siendo, por el momento, el mejor modelo de turbulencia con que se cuenta para propósitos prácticos.

2.2. Movimiento de las partículas.

A diferencia de las ecuaciones para la fase gaseosa, resueltas en un sistema euleriano, el movimiento de las partículas se describe según un enfoque lagrangiano, es decir, siguiendo la trayectoria de cada partícula individualmente mediante la integración de su ecuación de movimiento. Se considera una distribución discreta de tamaños de las partículas que ingresan a la cámara de combustión (n_d clases de diámetros) y un número discreto también de zonas de entrada (n_c compuertas anulares concéntricas

con el ducto de aire primario). Así, basta determinar $n_d \times n_c$ trayectorias distintas.

El movimiento de una partícula,suponiendo un flujo de masa uniforme desde su superficie, se rige por la ecuación de Newton:

$$F_p = m_p \frac{dv_p}{dt} \tag{2.7}$$

Se ha establecido que de las fuerzas que actúan sobre la partícula, la única cuya influencia es importante es el arrastre aerodinámico, con lo cual la ecuación (2.7) se tranforma en

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{1}{\tau}(v_g - v_p) \tag{2.8}$$

donde:

$$\tau = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_g} \frac{Re_p^{(0,47\beta^2-0,233\beta-0,2407)}}{(1+0,15\ Re^{0,687})\ (3,8975-2,8975\beta)} \tag{2.9}$$

$$Re_p = \frac{\rho_g d_p}{\mu_g} \| v_g - v_p \| \tag{2.10}$$

β es la esfericidad de la partícula, definida como el cuociente entre el área superficial de una partícula esférica equivalente de igual volumen y el área superficial real de la partícula:

$$\beta = \frac{\pi (6V_p/\pi)^{2/3}}{A_p} \tag{2.11}$$

Este parámetro se introduce para cuantificar en forma simple la influencia de la forma no esférica de las partículas. Para carbón pulverizado el valor recomendado[2] es $\beta = 0,7$. Las partículas son afectadas, además, por un proceso de hinchamiento durante la desvolatilización. Se supone[2] que el diámetro de la partícula tiende a aumentar en forma proporcional a su grado de desvolatilización, cuantificado a través de la masa de carbón aún sin reaccionar, m_{cp}. El diámetro de la partícula se calcula, por lo tanto, como[9]

$$d_p = \beta^{-1/2} (6V_p/\pi)^{1/3} [1+\gamma (m_{co}-m_{cp})/m_{co}] \tag{2.12}$$

con $\gamma = 0{,}1$ (2.13)

$$V_p = m_p/\rho_p \tag{2.14}$$

La integración de la ecuación (2.8) desde un instante t_o hasta $t_o + \Delta t$ (con Δt suficientemente pequeño para considerar τ y v_g constantes) entrega las componentes[7] de v_p al cabo de un lapso Δt:

$$u_p\,(t_o + \Delta t) = u_g - [u_g - u_p\,(t_o)]\; e^{-\Delta t/\tau} \tag{2.15a}$$

$$v_p\,(t_o + \Delta t) = v_g - [v_g - v_p\,(t_o)]\; e^{-\Delta t/\tau} + \frac{w^2{}_p(t_o)}{r}\,\tau\,(1 - e^{-\Delta t/\tau}) \tag{2.15b}$$

$$w_p\,(t_o + \Delta t) = \frac{w_p}{1+\tau K} - \left[\frac{w_g}{1+\tau K} - w_p\,(t_o)\right] e^{-(1/\tau + K)\Delta t} \tag{2.15c}$$

con $$K = \frac{2v_p(t_o)}{r} \tag{2.15d}$$

La nueva posición de la partícula se obtiene integrando la velocidad instantánea, supuesta igual a la velocidad media, en el intervalo Δt:

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \frac{1}{2}\left[\mathbf{v}_p\,(t_o + \Delta t) + \mathbf{v}_p\,(t_o)\right] \tag{2.16}$$

La posición de la partícula queda entonces determinada por las componentes

$$x_p\,(t_o + \Delta t) = x_p(t_o) + [\,u_p\,(t_o + \Delta t) + u_p(t_o)]\,\frac{\Delta t}{2} \tag{2.17 a}$$

$$r_p\,(t_o + \Delta t) = r_p(t_o) + [\,v_p\,(t_o + \Delta t) + v_p(t_o)]\,\frac{\Delta t}{2} \tag{2.17 b}$$

$$\theta_p\,(t_o + \Delta t) = \theta_p(t_o) + \left[\frac{w_p(t_o + \Delta t) + w_p(t_o)}{r_p(t_o + \Delta t) + r_p(t_o)}\right]\frac{\Delta t}{2} \tag{2.17 c}$$

La modelación incluye también la difusión de las partículas producida por las fluctuaciones turbulentas de la velocidad del gas (no se considera movimiento Browniano por ser despreciable, ni colisiones entre partículas por improbables). Para ello se simula el

comportamiento de la velocidad local del gas circundante a la partícula mediante la relación:

$$\mathbf{v}_{gl} = \mathbf{v}_g + C_k \mathbf{r}_a k^{1/2} \tag{2.18}$$

C_k es una constante empírica (se emplea aquí C_k=0,1), k la energía cinética turbulenta y $\mathbf{r}_a$ un vector de dirección aleatoria cuya magnitud fluctúa entre 0 y 1. Se supone que el efecto de $\mathbf{r}_a$ persiste durante el tiempo característico de la escala local de turbulencia dado por

$$t_t = \frac{k}{\varepsilon} \tag{2.19}$$

después del cual se recalcula $\mathbf{v}_{gl}$. Esta velocidad del gas es la que se usa en las ecuaciones (2.15), (2.17).

3. ECUACIONES TERMOQUIMICAS.

3.1 Ecuación de energía del gas

Para determinar el campo de temperatura del gas debe resolverse la ecuación de conservación de la energía. Dicho principio de conservación es una mezcla gas-partículas en estado estacionario se expresa en la forma general[2]†

$$\begin{aligned}\nabla \cdot [\rho'(h + ||\mathbf{v}_g||^2/2)\mathbf{v}_g] \;=\; & -\nabla\cdot[\theta\mathbf{Q}+(1-\theta)\mathbf{Q}_s]+Q_{pg}+\theta Q_R \\ & + r_p(\bar{h}_s+||\mathbf{v}_p||^2/2+||\mathbf{w}_p||^2/2) \\ & - \nabla \cdot [(1-\theta)p\ \mathbf{v}_p\ ] \\ & - \nabla \cdot [\theta\tau\cdot\mathbf{v}_g+(1-\theta)\tau_s\cdot\mathbf{v}_p] \\ & - \dot{W}_p+\ \mathbf{v}_g\cdot\mathbf{f}_c\ +\ \bar{p}_s S_V \qquad (3.1)\end{aligned}$$

que es una forma diferencial de la primera ley de la termodinámica. El subíndice s denota variables evaluadas en la superficie de control que rodea a las partículas contenidas en el elemento de volumen considerado (volumen de control, VC). El parámetro θ, denominado fracción de vacío, corresponde a la fracción del volumen de mezcla que es ocupado por el gas. Así, la densidad del gas en base al volumen de mezcla, ρ', se relaciona con la densidad propia del gas mediante

$$\rho' = \theta\rho \qquad (3.2)$$

El lado izquierdo de la ecuación (3.1) representa el transporte convectivo de la entalpía y energía cinética desde el VC. Los términos del lado derecho se interpretan como sigue (todos considerados por unidad de volumen):

$\nabla \cdot [\theta\ \mathbf{Q} + (1-\theta)\mathbf{Q}_s]$: transporte difusivo de energía debido a la transferencia de calor por conducción a través del gas y al transporte de entalpía asociado a la interdifusión de las NS especies gaseosas que lo componen. Estos flujos se encuentran contenidos en el vector $\mathbf{Q}$ definido como:

---

† De aquí en adelante todas las propiedades tales como μ,h,T, ρ,k,etc., se refieren al gas, a menos que el subíndice indique otra cosa.

$$\mathbf{Q} = -k \nabla T + \sum_{n=1}^{NS} \rho_n \mathbf{v}_{Dn} h_n \qquad (3.3)$$

El término dentro de la sumatoria es el flujo de entalpía de la especie n causado por su velocidad de difusión $\mathbf{v}_{Dn}$ respecto a la velocidad media del gas. En esta formulación se ha despreciado el transporte difusivo de energía cinética.

Q_{pg} : calor transferido por convección de las partículas al gas.

θQ_R : absorción neta de radiación térmica por parte del gas.

$r_p(\bar{h}_s + ||\mathbf{v}_p||^2/2 + ||\mathbf{w}_p||^2/2)$: flujo de entalpía y energía cinética que ingresa al VC con los gases emitidos desde la superficie de las partículas.

$\nabla \cdot [(1-\theta)p \mathbf{v}_p]$: potencia asociada al trabajo de flujo de los gases que se desprende de las partículas.

$\nabla \cdot [\theta\tau \cdot \mathbf{v}_g + (1-\theta)\tau_s \cdot \mathbf{v}_p]$: disipación viscosa, con τ el tensor de esfuerzo.

$\dot{W}_p$: potencia desarrollada por la fuerza de arrastre aerodinámico sobre las partículas.

$\mathbf{v}_g \cdot \mathbf{f}_c$: potencia desarrollada por las fuerzas de cuerpo sobre el gas.

$\bar{p}_s S_V$: potencia asociada al trabajo realizado contra la presión por la superficie de las partículas al dilatarse, siendo S_V la razón de dilatación.

Normalmente en sistemas típicos de combustión de carbón pulverizado se cumple que $\theta > 0{,}99$, por lo que es razonable tomar $\theta=1$ y anular el efecto de los términos con el factor $(1-\theta)$. Como se dijo anteriormente, no se consideran fuerzas de cuerpo y además la influencia de la dilatación de las partículas, la velocidad relativa de los gases emitidos por éstas respecto a sus centros de masa y la velocidad de interdifusión de las especies gaseosas se consideran despreciables. Con todas estas simplificaciones la ecuación (3.1) se reduce a

$$\nabla \cdot [\rho(h + ||\mathbf{v}_g||^2/2)\mathbf{v}_g] = \nabla \cdot [k \nabla T] + Q_{pg} + Q_R + r_p(\bar{h}_s + ||\mathbf{v}_p||^2/2) - \nabla \cdot [\tau \cdot \mathbf{v}_g] - \dot{W}_p \qquad (3.4)$$

Dado que $\nabla h = Cp \nabla T$, la conducción de calor a través del gas puede ponerse en términos de su entalpía como:

$$k \quad \nabla T = \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \quad \nabla h \tag{3.5}$$

siendo $$\sigma_h = \frac{\mu_{eff}\, Cp}{k} \tag{3.6}$$

el número de Prandtl del gas. El transporte difusivo se encuentra dominado por un mecanismo turbulento, razón por la que se emplea el coeficiente de viscosidad efectivo. El número de Prandtl efectivo así obtenido es generalmente del orden de la unidad, empleándose en esta modelación[9] σ_h=0,885. Reemplazando (3.5) en (3.4) y traspasando el transporte convectivo de energía cinética al lado derecho de la ecuación se obtiene finalmente

$$\nabla \cdot [\rho \mathbf{v}_g h] - \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_h}\right) \nabla h \right] = Q_{pg} + Q_R + r_p(\bar{h}_s + ||\mathbf{v}_p||^2/2)$$
$$- \nabla \cdot [\tau \cdot \mathbf{v}_g] - \dot{W}_p - \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}_g ||\mathbf{v}_g||^2/2] \tag{3.7}$$

La conveniencia de expresar (3.4) en esta forma queda clara en el capítulo 5. La solución de (3.7) entrega el campo de entalpía del gas, a partir del cual, y conocida su composición química, puede obtenerse el campo de temperatura.

3.2 Ecuaciones de conservación de especies químicas.

Anteriormente se mencionó que la mezcla gaseosa está formada por NS especies químicas. Definiendo σ_i, el número molar de la especie i, como el número de [kmol] de i por [kg] de gas, la composición química del gas en cualquier punto queda determinada por este grupo de variables, es decir, $\{\sigma_i,\ i=1,...,NS\}$. Se define, además, el número molar del gas como:

$$\sigma_m = \sum_{i=1}^{NS} \sigma_i \tag{3.8}$$

el cual resulta ser el recíproco de su masa molecular. Los $\{\sigma_i,\ i=1,...,NS\}$ en cada punto del campo se obtienen a partir de la ecuación de conservación de cada una de las especies. Se tienen, por lo tanto, NS ecuaciones de la forma

$$\nabla \cdot [\rho v_g \sigma_i] - \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\right) \nabla \sigma_i \right] = -r_i + {}_pS^{\sigma_i} \quad ; \qquad i=1,...,NS \qquad (3.9)$$

donde se iguala el transporte neto convectivo y difusional de la especie i, desde el VC, a su destrucción neta por reacción homogénea, r_i, más la fuente de especie i debido a las partículas; σ_s es el número de Schmidt efectivo, siendo el valor usual adoptado σ_s=1,3.

3.3 Combustión homogénea

La reacción exotérmica de las especies en fase gaseosa constituye la principal fuente de energía. Esta queda implícita en la ecuación (3.7) a través de los términos de balance de entalpía del gas, la que incluye la entalpía de formación de las especies constituyentes. La entalpía del gas está determinada por su composición y temperatura mediante las relaciones

$$h = \sum_{i=1}^{NS} \sigma_i h_i \qquad (3.10)$$

$$h_i = R \left(\sum_{n=1}^{5} \frac{1}{n} Z_{in} T^n + Z_{i6} \right) \qquad (3.11)$$

donde los coeficientes $\{Z_{in}; i=1,...,NS; n=1,...,6\}$ corresponden a regresiones disponibles. El último, Z_{i6}, es el que incluye la entalpía de formación. De este modo una variación en la composición del gas induce una variación en su temperatura si la entalpía ha de conservarse. Al existir combustión homogénea la composición del gas cambia a especies de entalpía menor lo cual debe ser compensado a través de un aumento en la temperatura para mantener el balance.

La modelación de la combustión homogénea se efectúa mediante mecanismos de reacción constituidos por cadenas de reacciones elementales. Estos mecanismos pueden llegar a ser bastante complicados por constar de un gran número de reacciones elementales, muchas de las cuales progresan en paralelo dando origen a nuevas ramificaciones, recombinaciones, etc, lo cual configura un complejo sistema de interconversión de las especies que forman el gas. Esta serie de reacciones, importante además para la estabilidad de la llama, ignición de las partículas y formación de

hollín y especies polutantes, es tal vez el aspecto menos comprendido de la combustión del carbón pulverizado[23]. Más aún, un tratamiento riguroso del proceso de reacción de los volátiles es una espectativa poco realista si se tiene en cuenta que involucra un flujo turbulento con cientos de especies químicas y reacciones.

Un mecanismo de reacción de JJ reacciones elementales reversibles se suele representar en la forma generalizada[8]

$$\sum_{i=1}^{NS} \alpha'_{ij}\, S_i + \alpha_j\, M \rightleftarrows \sum_{i=1}^{NS} \alpha''_{ij}\, S_i + \alpha_j\, M \qquad ; j=1,...,JJ \tag{3.12}$$

(JJ reacciones químicas de la forma (3.12)). Los términos α'_{ij} y α''_{ij} son los coeficientes estequiométricos de la especie i en la reacción j como reactante y producto respectivamente, mientras que α_j corresponde al coeficiente estequiométrico del catalizador M, si es que la reacción está catalizada. Por lo tanto, si la especie S_i participa como reactante en la reacción j, entonces $\alpha'_{ij} \neq 0$ y $\alpha''_{ij} = 0$; si lo hace como producto $\alpha'_{ij}=0$ y $\alpha''_{ij} \neq 0$; y si no participa en la reacción $\alpha'_{ij}=\alpha''_{ij}=0$. A su vez, $\alpha_j=1$ si la reacción está catalizada y $\alpha_j=0$ si no lo está. Se considera[2] que cualquier especie puede servir como catalizador, por lo que la concentración de M se toma igual a la del gas.

Aunque las reacciones elementales involucran dos o tres moléculas, el asignar valor cero a los coeficientes en una reacción es lo que posibilita que la sumatoria en (3.12) se extienda a las NS especies (y, en general, cualquier sumatoria que incluya a los coeficientes α_{ij}, o productoria que los incluya como exponentes de los factores). Esto permite un manejo matricial de los coeficientes estequiométricos, lo que resulta muy conveniente para fines computacionales.

Así, la rapidez de destrucción de la especie i en la reacción j se puede escribir en forma compacta como

$$r_{Dij} = \alpha'_{ij}\, r_{fj} + \alpha''_{ij}\, r_{bj} \tag{3.13}$$

siendo r_{fj} y r_{bj} las rapideces de reacción directa y reversa respectivamente de la reacción j. Al superponer el efecto de las JJ reacciones se tiene la rapidez de destrucción total:

$$r_{Di} = \sum_{j=1}^{JJ} \alpha'_{ij}\, r_{fj} + \alpha''_{ij}\, r_{bj} \tag{3.14}$$

Del mismo modo, la rapidez de creación total de la especie i se puede obtener como

$$r_{Ci} = \sum_{j=1}^{J\ J} \alpha''_{ij}\, r_{fj} + \alpha'_{ij}\, r_{bj} \qquad (3.15)$$

por lo que la rapidez neta de destrucción estará dada por

$$r_i = r_{Di} - r_{Ci} = \sum_{j=1}^{J\ J} (\alpha'_{ij} - \alpha''_{ij})(r_{fj} - r_{bj}) \qquad (3.16)$$

La concentración molar de cada especie es $\rho\sigma_i$ y la del gas $\rho\sigma_m$. Con esto, las rapideces de reacción se calculan según

$$r_{fj} = k_{fj} (\rho\sigma_m)^{\alpha_j} \prod_{i=1}^{NS} (\rho\sigma_i)^{\alpha'_{ij}} \qquad (3.17a)$$

$$r_{bj} = k_{bj} (\rho\sigma_m)^{\alpha_j} \prod_{i=1}^{NS} (\rho\sigma_i)^{\alpha''_{ij}} \qquad (3.17b)$$

donde k_{fj} y k_{bj} son las constantes cinéticas. Según la ecuación de Arrhenius:

$$k_{nj} = A_{nj}\, T^{N_{nj}} \exp\left(-\frac{E_{nj}}{RT}\right) \quad ; \ n=f,b \qquad (3.18)$$

El factor $A_{nj}\, T^{N_{nj}}$ junto con el producto de las concentraciones en (3.17) puede interpretarse como la frecuencia de las colisiones moleculares, de las cuales una fracción $\exp(-E_{nj}/RT)$ resultan "exitosas", es decir, de una energía superior a la energía de activación de la reacción, E_{nj}.

Ya que en la mayoría de los casos sólo se conoce la constante cinética para la reacción directa, la correspondiente a la reacción reversa debe obtenerse a partir de la constante de equilibrio de la reacción, basada en este caso en las concentraciones de las especies:

$$k_{bj} = \frac{k_{fj}}{K_{cj}} \qquad (3.19)$$

La constante de equilibrio se calcula como [9,24]

$$K_{cj} = \left(\frac{p_o}{RT}\right)^{n''_j - n'_j} \exp\left[\sum_{i=1}^{NS}\left(\alpha'_{ij} - \alpha''_{ij}\right)\frac{g_i^o}{RT}\right] \qquad ; j=1,...,JJ \qquad (3.20)$$

con

$$n'_j = \sum_{i=1}^{NS} \alpha'_{ij} \qquad (3.21a)$$

$$n''_j = \sum_{i=1}^{NS} \alpha''_{ij} \qquad (3.21b)$$

p_o : presión atmosférica (estado de referencia)

El argumento de la función exponencial corresponde al cambio en la energía libre estándar (función de Gibbs) asociado a la reacción j. Esta propiedad también puede calcularse mediante las regresiones disponibles ya que

$$g_i = h_i - Ts_i \qquad (3.22)$$

El modelo químico actualmente implementado en el programa se halla sumamente simplificado, por problemas de convergencia de la solución. Las simplificaciones se encuentran principalmente en el mecanismo de reacción del H_2, y no se incluye el mecanismo de CH_4 que es un componente importante de los volátiles. Una discusión detallada de los mecanismos de reacción y las razones de su adopción y simplificación puede verse en la ref.[9]. Las especies que se incluyen son:

TABLA 3.1†

i	1	2	4	5	6	7	8	9	10	15
especie	H_2	H_2O	CO	CO_2	C_nH_m	O_2	H	OH	O	N_2

El mecanismo de reacción considerado es* :

† La numeración que se da aquí corresponde a la que identifica cada especie dentro de las matrices de datos del programa, las que incluyen más especies que las mencionadas . Por esto, la numeración no es correlativa.

* Energías de activación en [kcal/mol] .

$$O + H_2 \rightarrow H + OH \qquad k_f = 1{,}8 \cdot 10^7\, T^1 \exp\left(-\frac{8.9}{RT}\right) \qquad (3.23a)$$

$$H + OH + M \rightarrow H_2O + M \qquad k_f = 7{,}1 \cdot 10^{13}\, T^{-1} \exp\left(\frac{0}{RT}\right) \qquad (3.23b)$$

$$CO + O_2 \rightarrow CO_2 + O \qquad k_f = 1{,}6 \cdot 10^{10}\, T^0 \exp\left(-\frac{40.8}{RT}\right) \qquad (3.23c)$$

$$CO + O + M \rightarrow CO_2 + M \qquad k_f = 3{,}6 \cdot 10^{15}\, T^{-1} \exp\left(-\frac{2.5}{RT}\right) \qquad (3.23d)$$

$$C_nH_m + \frac{n}{2} O_2 \rightarrow nCO + \frac{m}{2} H_2 \qquad r_f = 6{,}0 \cdot 10^1 T p^{0,3} (\rho\sigma_6)^{0,5} (\rho\sigma_7) \exp\left(-\frac{24.2}{RT}\right) \qquad (3.23e)$$

La última ecuación corresponde a una reacción global irreversible de los hidrocarburos pesados, donde se supone que la pseudomolécula C_nH_m reemplaza a todos los hidrocarburos desvolatilizados más pesados que el CH_4. En base a la razón molar C/H se toma C_nH_m = C_3H_5. La influencia del CH_4 se modela indirectamente considerando la desvolatilización de CH_4 como una fuente corregida de C_nH_m.

De lo que antecede se puede apreciar el fuerte acoplamiento que existe entre la ecuación de energía del gas y las ecuaciones de conservación de especies. La ecuación (3.10) conecta la composición del gas con su campo de entalpía, el cual depende de la temperatura según un polinomio de quinto grado. Esta, a su vez,influye a través de r_i en las ecuaciones (3.9) de un modo altamente no lineal, dada la dependencia exponencial de las constantes cinéticas, con lo cual pequeñas variaciones relativas en la temperatura pueden aumentar varias veces las rapideces de reacción. Estas fuertes influencias recíprocas de las variables termoquímicas y el carácter marcadamente no lineal de las mismas constituyen, como se verá, un factor crítico para el acoplamiento de la ecuación de energía al modelo ya desarrollado.

3.4. Comentario

Hasta ahora no se ha mencionado la influencia de la turbulencia en la combustión homogénea. La modelación de la combustión turbulenta debe tomar en cuenta, al menos, tres procesos[2]:

a) macromezcla: asociada a la recirculación convectiva y vórtices turbulentos.

b) micromezcla: después de la macromezcla es necesaria una reducción de la escala por rompimiento turbulento de los vórtices y

difusión molecular, para que puedan ocurrir las interacciones moleculares.

c) cinética química: cuando los procesos de mezcla (a) y (b) finalmente permiten la colisión de moléculas, éstas pueden reaccionar a razón finita según lo explicado anteriormente.

Se considera que el proceso de macromezcla es adecuadamente predicho por el modelo k-ε ; no así el de micromezcla, lo que puede conducir, en algunos casos, a errores considerables en el cálculo de las rapideces de reacción. Al ser el flujo turbulento los valores locales de T, σ_i. ρ, etc. fluctúan rápidamente en el tiempo y, por consiguiente, las ecuaciones (3.17) describen sólo el valor instantáneo de r_j (r_{fj} o r_{bj}) y no su promedio temporal, $\overline{r}_j$. Para obtener $\overline{r}_j$ es necesario hacer una "descomposición de Reynolds" de (3.17), es decir, expresar el valor instantáneo de las variables independientes como la suma de una media temporal y una fluctuación turbulenta. Así se tiene

$$T = \overline{T} + T' \tag{3.24}$$

$$\sigma_i = \overline{\sigma}_i + \sigma_i' \tag{3.25}$$

Tal desarrollo puede encontrarse en la ref [2] donde, despreciando las fluctuaciones de presión y σ_m, y después de considerable manipulación matemática, se llega a una expresión de la forma

$$\overline{r}_j(T, \sigma_i) = X_j \, r_j(\overline{T}, \overline{\sigma}_i) \tag{3.26}$$

o sea, $\overline{r}_j$ se obtiene como la rapidez de reacción instantánea evaluada en valores promedios de las variables con un factor de corrección , X_j, llamado índice de contacto. Si la energía de activación de una reacción es alta o si la temperatura media local es baja pueden resultar valores elevados de X_j lo que indica que para reacciones lentas o bajas temperaturas existe una fuerte influencia de la micromezcla turbulenta. Lamentablemente X_j es una función muy complicada de términos de correlación, y para el caso de NS especies la evaluación suficientemente aproximada de los X_j implica modelar los siguientes términos de correlación:

a) $\overline{T'^2}$

b) $\overline{T'^3}$

c) NS términos de la forma $\overline{\sigma_i' T'}$

d) NS términos de la forma $\overline{\sigma_i' T' T'}$

e) a lo sumo NS (NS-1)/2 términos de la forma $\overline{\sigma_i' \sigma_k'}$

f) a lo sumo NS (NS-1)/2 términos de la forma $\overline{\sigma_i' \sigma_k' T'}$

Actualmente no se tienen modelos para estas correlaciones, aunque sí se han desarrollado algunos métodos aproximados basados en una modelación probabilística (en la sección 5.5 se dan más detalles). Estos métodos son aún recientes y su exactitud no ha sido establecida. Por lo tanto, ya que la interacción de la turbulencia y la cinética química es un problema aún no resuelto, el efecto de la micromezcla no se considera en este trabajo.

3.5 Densidad del Gas

Toda la influencia de las variables termoquímicas sobre el campo de flujo se concentra en la densidad del gas, único nexo explícito que retroalimenta las ecuaciones de momentum a partir de los resultados de las ecuaciones termoquímicas.
La densidad del gas se calcula según la ecuación de estado del gas ideal:

$$\rho = \frac{p}{RT} M_g = \frac{p}{RT\sigma_m} \qquad (3.27)$$

3.6 Disipación Viscosa

El término $- \nabla \cdot (\tau \cdot v_g)$ en la ecuación de energía del gas es el trabajo, por unidad de tiempo y volumen, realizado sobre el gas por las fuerzas viscosas. Esta cantidad es de importancia sólo en flujos de alta velocidad. En quemadores de carbón pulverizado las velocidades son relativamente bajas ($M < 0{,}2$), por lo que cabe esperar que la contribución de la disipación viscosa a la fuente total de energía sea muy reducida, incluso en condiciones de capa límite. Aún así se opta por incluirla para mayor completitud de la modelación.

Sea $\mathbf{D} = \tau \cdot \mathbf{v}_g$, sus componentes son:

$$D_i = \sum_j \tau_{ij} \, v_{gj} \tag{3.28}$$

mientras que las componentes del tensor de esfuerzo, en coordenadas cilíndricas, son[1]:

$$\tau_{xx} = -\mu \left[2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \right] \tag{3.29a}$$

$$\tau_{rr} = -\mu \left[2\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \right] \tag{3.29b}$$

$$\tau_{\theta\theta} = -\mu \left[2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{v}{r}\right) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \right] \tag{3.29c}$$

$$\tau_{xr} = \tau_{rx} = -\mu \left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x} \right] \tag{3.29d}$$

$$\tau_{x\theta} = \tau_{\theta x} = -\mu \left[\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta} \right] \tag{3.29e}$$

$$\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = -\mu \left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial \theta} \right] \tag{3.29f}$$

Los esfuerzos de Reynolds quedan considerados al tomar $\mu = \mu_{eff}$. Puesto que el campo de flujo se supone axisimétrico, $\partial/\partial\theta = 0$. Introduciendo esta simplificación y desarrollando se obtiene:

$$-\nabla \cdot (\tau \cdot \mathbf{v}_g) = \frac{\partial D_x}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r \, D_r) \tag{3.30}$$

donde

$$D_x = -\mu_{eff} \left\{ u\left[\frac{4}{3}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv)\right] + v\left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x}\right] + w\frac{\partial w}{\partial x} \right\} \tag{3.31}$$

$$D_r = -\mu_{eff} \left\{ u\left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x}\right] + v\left[\frac{4}{3}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{v}{r}\right)\right] + w\frac{\partial w}{\partial r} - \frac{w^2}{r} \right\} \tag{3.32}$$

3.7 Absorción de radiación

La modelación del campo de radiación se describe en el capítulo 6. Por ahora sólo se dirá aquí que siendo $\mathbf{q}_R$ el vector que cuantifica el flujo neto de radiación en cada punto del campo, la absorción neta de radiación por la mezcla gas-partículas en un volumen de control es[25] $-\nabla \cdot \mathbf{q}_R$.

3.8 Fuentes debido a las partículas

Tanto en la ecuación de energía como en las de conservación de especies aparecen términos fuentes debido a la presencia de las partículas en el VC. La fuente asociada a las partículas de una cantidad (ya sea energía, especies, momentum o masa) debe calcularse sumando la transferencia de tal cantidad al gas desde todas las partículas contenidas en el VC.

El número de partículas de diámetro $d_p(l)$ (l-ésima clase de tamaño) que ingresan por la compuerta k durante el intervalo de tiempo Δt (intervalo de integración de la trayectoria) es

$$N_{\Delta t}(k,l) = \frac{\dot{m}_c}{m_{po}(l)} f_d(l)\, f_c(k)\, \Delta t \qquad (3.33)$$

en donde $f_d(l)$ y $f_c(k)$ son las fracciones másicas de partículas pertenecientes a la clase de tamaño l y compuerta k respectivamente, y $m_{po}(l)$ es la masa inicial de las partículas de la clase l:

$$m_{po}(l) = \rho_p \frac{\pi}{6} d_p^3(l) \qquad (3.34)$$

Ya que las partículas ingresan a razón constante, el número de partículas de diámetro $d_p(l)$ que entraron por la compuerta k en Δt, contenidas en el VC sobre una trayectoria es

$$N_{kl} = \frac{1}{2\pi} N_{\Delta t}(k,l) \frac{t_{kl}}{\Delta t} \qquad (3.35)$$

con t_{kl} el tiempo que tarda una partícula sobre la trayectoría (k,l) en atravesar el VC. El factor $1/2\pi$ se debe a que los VC tienen una amplitud angular de 1[rad] mientras que las $N_{\Delta t}(k,l)$ partículas entran por una compuerta anular (2π[rad]). El número de partículas contenidas en el VC se obtiene sumando los N_{kl} para todas las trayectorias que lo cruzan.

3.8.1 Transferencia de masa

La transferencia de masa de las partículas al gas corresponde principalmente a la emisión de gases durante su pirólisis o desvolatización y combustión heterogénea. El modelo más común

empleado para la desvolatilización es el que considera la formación de dos tipos de volátiles a través de un par de reacciones paralelas irreversibles[2,9,23]

$$C \xrightarrow{k_1} \alpha_1 V_1 + (1-\alpha_1) S_1 \qquad (3.36a)$$

$$C \xrightarrow{k_2} \alpha_2 V_2 + (1-\alpha_2) S_2 \qquad (3.36b)$$

donde α_1, α_2 son las fracciones másicas de carbón que se transforma en los volátiles V_1, V_2 respectivamente, y k_1, k_2 constantes según la forma de Arrhenius:

$$k_m = A_m \exp\left(-\frac{E_m}{RT_p}\right) \quad ; m = 1,2 \qquad (3.37)$$

Este modelo ha mostrado buena correlación con datos experimentales, aunque resultados más recientes[23] lo han puesto en cuestionamiento. Nuevos métodos, más complejos, se encuentran en desarrollo, los cuales, no obstante, requieren un conocimiento detallado de la química del carbón y su rango de validez no ha sido establecido.

En general, α_m, A_m y E_m dependen del tipo de carbón. De momento no se cuenta con información específica al respecto por lo que el código computacional considera valores fijos para todos los tipos de carbón que pueden modelar, los cuales se dan en la tabla 3.2.

Tabla 3.2 Constantes del modelo de pirólisis.

m	α_m	A_m [1/s]	E_m [kcal/mol]
1	0,3	$2,0 \cdot 10^5$	25
2	1,0	$1,3 \cdot 10^7$	40

Las especies que componen los volátiles V_m son H_2, H_2O, CH_4, CO, CO_2 y C_nH_m, estando tal composición determinada por las fracciones másicas de cada especie, ϕ_{jm}. Dichos valores pueden verse en la ref.[9] para diferentes tipos de carbón. De este modo, la rapidez a la cual la especie j es transferida al gas por desvolatilización desde una partícula se puede calcular como

$$r_{jV} = \sum_{m=1}^{2} \phi_{jm} r_{Vm} \qquad (3.38)$$

con $$r_{Vm} = \alpha_m \, m_{cp} \, k_m \qquad (3.39)$$

siendo m_{cp} la masa de carbón aún sin reaccionar en la partícula. La fracción restante de m_{cp} se transforma en coque a una rapidez de

$$r_{hm} = (1- \alpha_m) \, m_{cp} \, k_m \qquad (3.40)$$

El coque reacciona heterogéneamente con especies gaseosas que circundan a la partícula. Aunque, en rigor, tal reacción puede tener lugar con O_2, H_2O, CO_2 y H_2 ,para quemadores de carbón pulverizado[2] la rapidez de reacción con O_2 es mayor por varios órdenes de magnitud, por lo que para los cálculos de combustión heterogénea basta considerar sólo la reacción con esta especie:

$$C^* + O_2 \xrightarrow{k_H} CO_2 \qquad (3.41)$$

La rapidez de esta reacción está dada por:

$$r_H = k_H \, p_{O_2}^{n} \, A_p \qquad (3.42)$$

con p_{O_2} la presión parcial de O_2 en [kPa], A_p el área superficial de la partícula y

$$k_H = \begin{cases} A_H T_p^N \exp(-E_H/RT) & ; \; T_p \leqslant 1650 \; [K] \\ -4.82 \cdot 10^{-2} + 3.8 \cdot 10^{-5} \, T_p & ; \; T_p > 1650 \; [K] \end{cases} \qquad (3.43)$$

El límite de temperatura dado corresponde a carbones bituminosos y de bajo rango. Para estos carbones las constantes recomendadas[2] son: n=1; $A_H = 8{,}6 \cdot 10^2$ [kg/s m^2 kPa]; $E_H/R = 1{,}8 \cdot 10^4$ [K] ; N=0.
La producción total de gases de la partícula resulta entonces

$$r_p = \sum_{m=1}^{2} r_{Vm} + r_H + r_W \qquad (3.44)$$

El último término corresponde a la rapidez de evaporación de humedad. Para esto no se cuenta, por ahora, con un modelo confiable, por lo cual se adoptó[9] un valor constante de $r_W = 10^{-9}$ [kg/s].

3.8.2 Fuente de energía

Las fuentes de energía asociadas a las partículas, señaladas en (3.1), se agrupan en el término fuente

$$ {}_pS^h = Q_{pq} + r_p(\bar{h}_s + ||v_p||^2/2) - \dot{W}_p \qquad (3.45) $$

La transferencia de calor por convección desde una partícula esférica inmersa en un flujo se puede calcular como

$$ q_{pg} = Nu \frac{k_g}{d_p} A_p (T_p - T_g) \qquad (3.46) $$

Para el número de Nusselt en flujo incompresible se tiene la ecuación empírica[1,2]

$$ Nu_o = 2 + 0{,}654\ Re_p^{1/2}\ Pr^{1/3} \qquad (3.47) $$

con Re_p dado por (2.10) y

$$ Pr = \frac{\mu_g Cp_g}{k_g} \qquad (3.48) $$

El parámetro de esferidad permite el tratamiento aproximado de partículas no esféricas, de modo que el área de la partícula se calcula simplemente como

$$ A_p = \pi d_p^2 \qquad (3.49) $$

con d_p el diámetro corregido según (2.12).

Como en la presente modelación el flujo es de baja velocidad, la influencia del número de Mach sobre Nu_o es despreciable, a menos que Re_p fuera también muy cercano a cero, lo cual llevaría a condiciones de flujo rarificado[2]. Tal condición es ponderada por el número de Knudsen, Kn. Para combustión de carbón pulverizado[2,7] $Kn << 1$, por lo que la correlación (3.47) es aplicable a este caso. No obstante, Nu_o es afectado también por el desprendimiento de gases desde la partícula. Este efecto se incluye mediante el parámetro de transferencia de masa, B, de acuerdo a

$$ Nu = Nu_o\ e^{-0{,}6B} \quad , \qquad \begin{matrix} Re_p \leq 400 \\ 0{,}7 \leq Sc \leq 10 \end{matrix} \qquad (3.50) $$

donde

$$B = \frac{r_p \, Cp_g}{2\pi d_p k_g} \tag{3.51}$$

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g \, D_m} \tag{3.52}$$

En todos estos cálculos las propiedades del gas se deben evaluar a la temperatura de película

$$T_f = (T_g + T_p)/2 \tag{3.53}$$

Para tomar en cuenta los efectos de la turbulencia se emplean los valores efectivos para μ_g, k_g y Pr.

El calor, por unidad de volumen, transferido por convección de las partículas al gas es entonces

$$Q_{pg} = \frac{1}{\Delta V} \sum_k \sum_l N_{kl} \, q_{pgkl} \tag{3.54}$$

donde ΔV es el volumen del VC y la sumatoria incluye sólo las trayectorias (k,l) que lo cruzan.

De igual modo, el flujo total de entalpía y energía cinética de los gases que se desprenden de las partículas estará dado por

$$H_p = \frac{1}{\Delta V} \sum_k \sum_l N_{kl} \, r_{pkl} (\bar{h}_s + ||v_p||^2/2)_{kl} \tag{3.55}$$

con r_{pkl} la rapidez de producción de gases de una partícula sobre la trayectoria (k,l) , calculada según lo expuesto en 3.8.1. La entalpía promedio de los gases emitidos se determina en base a los calores específicos de reacción heterogénea y desvolatilización y la entalpía de evaporación del agua, los cuales se toman constantes para evitar complicaciones adicionales. Con esto se tiene [9]

$$\bar{h}_s = h_p - \frac{1}{r_p} (r_H \cdot 4 \cdot 10^6 - \sum_{m=1}^{2} r_{Vm} \cdot 1{,}73 \cdot 10^6 - r_W \cdot 2{,}258 \cdot 10^6) \tag{3.56}$$

La entalpía de la partícula, h_p, se calcula mediante regresiones de propiedades de especies sólidas, considerando, a falta de mayor información, al coque como único componente.

El trabajo realizado por la fuerza de arrastre sobre una partícula se determina sumando los trabajos efectuados durante cada

intervalo Δt mientras la partícula está dentro del VC. Al dividir por el tiempo que demora la partícula en cruzar el VC y por el volumen de éste se obtiene la potencia media desarrollada por unidad de volumen. Si $\Delta \mathbf{r}$ es el vector desplazamiento de la partícula en cada Δt, entonces para una partícula sobre la trayectoria (k,l) que pasa por el VC se toma

$$\dot{W}_{pkl} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{t=t_o}^{t_o+t_{kl}} (\mathbf{F}_{p\Delta tkl} \cdot \Delta \mathbf{r}_{kl})/t_{kl} \qquad (3.57)$$

La sumatoria comprende desde el instante de entrada al VC, t_o, hasta la salida en $t_o + t_{kl}$ y contiene, en consecuencia, $t_{kl}/\Delta t$ sumandos. $\mathbf{F}_{p\Delta t}$ es la fuerza de arrastre sobre la partícula en Δt, dada por[7]

$$\mathbf{F}_{p\Delta t} = m_p \frac{1}{\tau} (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_p) \qquad (3.58)$$

Al superponer el efecto de todas las trayectorias que cruzan el VC se obtiene

$$\dot{W}_p = \sum_k \sum_l N_{kl} \dot{W}_{pkl} \qquad (3.59)$$

la cual, por ser potencia desarrollada por el gas sobre las partículas, constituye realmente un sumidero para la ecuación de energía.
La fuente total de energía debido a las partículas resulta finalmente

$${}_pS^h = \frac{1}{\Delta V} \sum_k \sum_l N_{kl} \left[q_{pgkl} + r_{pkl} (\bar{h}_s + ||\mathbf{v}_p||^2/2)_{kl} - \sum_{t=t_o}^{t_o+t_{kl}} (\mathbf{F}_{p\Delta tkl} \cdot \Delta \mathbf{r}_{kl})/t_{kl} \right] \qquad (3.60)$$

3.8.3 Fuentes de especies

El flujo másico de especie j desde una partícula al gas puede calcularse a partir de lo señalado en 3.8.1 como

$$r_j = \sum_{m=1}^{2} r_{jVm} + r_{jH} \qquad ; j=1,...,6^{\dagger} \tag{3.61}$$

Si j = 2 (H_2O) debe sumarse además la razón de evaporación de humedad. El término debido a la combustión heterogénea es distinto de cero sólo para CO_2 y O_2, siendo

$$r_{5H} = r_H \frac{M_{CO_2}}{M_C} \tag{3.62}$$

$$r_{7H} = - r_H \frac{M_{O_2}}{M_C} \tag{3.63}$$

El flujo molar total de j, por unidad de volumen, hacia el gas es, por lo tanto

$${}_pS^{\sigma_j} = \frac{1}{\Delta V\ M_j} \sum_k \sum_l N_{kl}\, r_{jkl} \tag{3.64}$$

fuente que aparece en la ecuación de conservación de la especie respectiva.

3.9 Ecuación de energía de las partículas

La conservación de energía de una partícula se expresa en la ecuación

$$m_p \frac{di_p}{dt} = q_p + (\bar{h}_s - h_p) \frac{dm_p}{dt} \tag{3.65}$$

donde se ha despreciado la energía cinética de los gases emitidos desde su superficie; q_p es el calor total transferido a la partícula y ($\bar{h}_s$ - h_p), la diferencia de entalpía entre los gases emitidos y la partícula, que se calcula a partir de la ecuación (3.56).

Suponiendo que la temperatura es uniforme en toda la partícula, la variación de su energía interna puede escribirse en términos de su temperatura como

$$\frac{di_p}{dt} = Cp_p \frac{dT_p}{dt} \tag{3.66}$$

---

† Numeración según tabla 3.1

Por su parte, el decaimiento de masa de la partícula está dado por

$$\frac{dm_p}{dt} = - r_p \qquad (3.67)$$

q_p comprende el calor transferido por convección y radiación a la partícula. El primero ya fue tratado en el punto 3.8.2; en cuanto al intercambio radiativo con el medio circundante, bajo el supuesto de que la partícula se comporta como cuerpo gris, la radiación emitida es $A_p\varepsilon_p\sigma T_p^4$, mientras que la absorción es $\alpha_p A_p \overline{F}$, siendo $\overline{F}$ el flujo medio de radiación que incide sobre la superficie de la partícula. Como se verá en el capítulo 6, tal cantidad puede evaluarse como $\overline{F} = Fx + Fr$, con Fx y Fr los flujos medios de radiación en dirección axial y radial respectivamente. Por la ley de Kirchhoff $\alpha_p = \varepsilon_p$, con lo que la trasferencia neta de calor por radiación a la partícula resulta

$$q_{pR} = A_p\varepsilon_p(Fx + Fr - \sigma T_p^4) \qquad (3.68)$$

Empleando la ecuación (3.46) para la transferencia convectiva se obtiene

$$q_p = - Nu \frac{k_g}{d_p} A_p (T_p - T_g) + A_p\varepsilon_p(Fx + Fr - \sigma T_p^4) \qquad (3.69)$$

Substituyendo (3.66), (3.67) y (3.69) en (3.65) y reagrupando términos se llega a una ecuación diferencial no lineal de primer orden para la temperatura de la partícula:

$$\frac{dT_p}{dt} = aT_p^4 + bT_p + c \qquad (3.70)$$

donde

$$a = - A_p\varepsilon_p\sigma/(m_p Cp_p) \qquad (3.71)$$

$$b = - Nu\, k_g\, A_p/(d_p\, m_p\, Cp_p) \qquad (3.72)$$

$$c = - bT_g + [A_p\varepsilon_p(Fx + Fr) - r_p(\overline{h}_s - h_p)]/(m_p Cp_p) \qquad (3.73)$$

Esta ecuación debe resolverse numéricamente pues no se conoce su solución analítica. Sin embargo, para los valores que se tienen en esta aplicación su resolución numérica es sumamente inestable (la solución para T_p aumenta a valores inadmisibles, oscilando incluso hasta

valores negativos). Este hecho ya fue reportado en un trabajo anterior[9], donde se intenta resolver mediante un método Runge-Kutta de cuarto orden, para el caso sin radiación. El incluir el campo de radiación no modifica la condición de inestabilidad, la cual se presenta aún para el método Adams-Moulton de orden 3 (un método multipaso implícito, de 3 pasos) el que posee importantes ventajas de estabilidad sobre los métodos Runge-Kutta.

Para explicar el mal condicionamiento del problema considérese la ecuación (3.70) escrita en la forma $\frac{dT_p}{dt} = f(T_p, t)$; entonces

$$\frac{\partial f}{\partial T_p} = 4aT_p^3 + b \qquad (3.74)$$

Esta derivada, aunque negativa, llega a tomar valores muy grandes en magnitud (> 40.000), por lo que (3.70) pasa a constituir[26] lo que se conoce como una ecuación diferencial "stiff" (con "rigidez"). Este tipo de problema resulta inmanejable por los métodos tradicionales y debe usarse algún método especializado. Por lo tanto, se decide mantener la simplificación $T_p=T_g$ empleada anteriormente, ya que un análisis más profundo sobre este punto no se contempla dentro de los objetivos de este trabajo.

4. ESPECIES POLUTANTES

Se presentan aquí los principales aspectos relacionados con la formación de especies polutantes. Como se verá, para casi todas no existen aún mecanismos completos y precisos para explicar su formación siendo, en algunos casos, bastante escaso el conocimiento que se tiene actualmente.

Los polulantes formados en la combustión de carbón pulverizado pueden clasificarse en dos grupos principales[2]. El primero incluye polutantes comunes a cualquier sistema de combustión industrial: CO, NO_x, hollín e hidrocarburos sin quemar. El segundo comprende especies formadas a partir de las impurezas en el carbón: principalmente compuestos sulfurados y nitrogenados y cenizas volantes. Adicionalmente se emiten contaminantes inorgánicos como Cl, F, y trazas de metales tóxicos.

La formación de CO ya está considerada en el modelo de combustión implementado, y en cierta forma los hidrocarburos sin quemar, a través de la especie C_nH_m.

4.1 Polutantes nitrogenados

Para carbón pulverizado los polutantes nitrogenados son NO, NO_2 y N_2O. De los tres el NO es el más contaminante, siendo los otros de importancia secundaria. Bajo condiciones reductoras pueden formarse también cianuros y aminas (HCN, NH_3). Se han identificado tres formas de emisión: NO térmico, NO inducido y NO del carbón.

4.1.1 NO térmico y NO inducido

El NO térmico se forma por reacción del nitrógeno del aire de combustión, lo que ocurre predominantemente en zonas de la cámara de combustión de alta temperatura, pobres en combustible. La reacción se explica mediante el mecanismo de Zeldovich[2,14]:

(1) $N_2 + O \rightarrow NO + N$ $\qquad k_f = 1{,}4 \cdot 10^{11}\, T^0 \exp(-37.950/T)$

(2) $O_2 + N \rightarrow NO + O$ $\qquad k_f = 6{,}4 \cdot 10^{6}\, T^1 \exp(-3.150/T)$

al que se agrega una tercera reacción

(3) $N + OH \rightarrow NO + H$ $\qquad k_f = 6{,}3 \cdot 10^{8}\, T^{0,5} \exp(-0/T)$

existiendo gran diversidad de datos en torno a esta tercera constante cinética. Otros valores sugeridos son: [15,16,17]
$4{,}1 \cdot 10^{10}$ exp(-403/T); $4{,}1 \cdot 10^{10}$; $3{,}8 \cdot 10^{10}$ respectivamente.

A temperaturas menores de 1600[K] aproximadamente, la rapidez de formación de NO es baja, según el mecanismo de Zeldovich, debido a la elevada energía de activación de la reacción(1). Sin embargo, si esto se considera en el contexto de combustión turbulenta la importancia del mecanismo de Zeldovich se extiende a temperaturas medias menores, a causa de que las fluctuaciones turbulentas de la temperatura refuerzan no linealmente la rapidez de formación.

Para la formación de NO a bajas temperaturas se propone el siguiente mecanismo, que procede mediante la formación intermedia de N_2O:[2,16]

(4) $N_2 + O + M \rightarrow N_2O + M$	$k_f = 1{,}62 \cdot 10^8\ T^0\ \exp(-1.600/T)$
(5) $N_2O + O \rightarrow 2NO$	$k_f = 4{,}57 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-12.130/T)$
(6) $N_2O + O \rightarrow N_2 + O_2$	$k_f = 3{,}80 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-12.130/T)$
(7) $N_2O + H \rightarrow N_2 + OH$	$k_f = 2{,}95 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-5.420/T)$

Para aplicaciones de combustión (5), (6) y (7) pueden suponerse irreversibles.

Como se mencionó, el NO térmico se forma preferentemente en zonas pobres en combustible. En condiciones de mezcla rica los mecanismos anteriores pierden importancia debido a la baja concentración de átomos de O. En estas áreas, la inclusión de un mecanismo para NO inducido ha sido necesaria para explicar datos experimentales.

La formación de especies CH_i controla la generación del NO inducido. De la gran cantidad de reacciones propuestas las importantes son[17]

(8) $CH_3 + OH \rightarrow CH_2 + H_2O$	$k_f = 1{,}5 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-2.156/T)$
(9) $CH_3 + H \rightarrow CH_2 + H_2$	$k_f = 9{,}1 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-7.598/T)$
(10) $CH_2 + OH \rightarrow CH + H_2O$	$k_f = 4{,}5 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-1.510/T)$
(11) $CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$	$k_f = 7{,}3 \cdot 10^{14}\ T^{-1{,}56}\ \exp(-0/T)$
(12) $CH + H \rightarrow C + H_2$	$k_f = 1{,}5 \cdot 10^{11}\ T^0\ \exp(-0/T)$

Hay aún alguna controversia sobre cuál reacción es el paso inicial en la formación de NO inducido. No obstante, si en principio pueden concebirse muchos tipos de radicales hidrocarburos de corta vida que ataquen al N_2, el número de radicales posibles se ha reducido a dos

(13) $CH + N_2 \rightarrow HCN + N$ $\quad k_f = 1{,}9 \cdot 10^8\, T^0 \exp(-6.844/T)$

(14) $CH_2 + N_2 \rightarrow HCN + NH$ $\quad k_f = 1{,}0 \cdot 10^{10}\, T^0 \exp(-37.237/T)$

De estas dos reacciones, la (13) es probablemente la principal. La formación de NO tiene lugar por una oxidación posterior de los productos de estas reacciones según los mecanismos que se describen en 4.1.2.

En cuanto a la oxidación del NO a NO_2 el mecanismo es: [2,16]

(15) $NO + O + M \rightarrow NO_2 + M$ $\quad k_f = 3{,}92 \cdot 10^7\, T^1 \exp(4.800/T)$

(16) $NO_2 + O \rightarrow NO + O_2$ $\quad k_f = 1{,}00 \cdot 10^{10}\, T^0 \exp(-300/T)$

(17) $NO_2 + H \rightarrow NO + OH$ $\quad k_f = 7{,}24 \cdot 10^{11}\, T^0 \exp(-970/T)$

A temperaturas normales de combustión estas reacciones pueden tomarse como irreversibles y la concentración de NO_2 en estado estacionario resulta entonces†

$$[NO_2] = \frac{k_{f15}[NO][O][M]}{k_{f16}[O] + k_{f17}[H]} \qquad (4.1)$$

Si la combustión es a presión atmosférica se tiene[2] $[NO_2]/[NO] < 10^{-2}$.

4.1.2 NO del carbón

El NO del carbón corresponde al formado a partir del nitrógeno contenido en él (0,5 - 2% en masa), y es la fuente principal de NO en combustión de carbón pulverizado[23], contribuyendo con más de 80% de la emisión total.

Existe evidencia experimental de que el nitrógeno es involucrado tarde en el proceso de desvolatilización de las partículas. Tiende a permanecer en el carbón a bajas temperaturas (1370-1700[K]), mientras que a temperaturas suficientemente altas la fracción másica de nitrógeno volatilizado excede la fracción másica total volatilizada. Una correlación propuesta en relación a esto es[2]:

$$\frac{m_{Nv}}{m_{Nc}} = 1{,}95\, f_v - 0{,}56 \qquad (4.2)$$

donde

m_{Nv} : masa de nitrógeno volatilizado

m_{Nc} : masa inicial de nitrógeno en el carbón

f_v : fracción total de masa volatilizada

---

† [S] denota concentración de la especie S, [kmol/m^3] .

El nitrógeno del carbón forma NO a través de especies intermedias HCN, NH_i y otras, mediante un complejo mecanismo. A temperaturas altas (>1375[K] aprox.) la principal especie nitrogenada producto de la pirólisis es el HCN, el cual tendería a equilibrarse con CN a través de la reacción[2]

(1) $HCN + H \rightarrow CN + H_2$

con una constante de equilibrio $K = 2{,}3 \exp(-8.340/T)$ (4.3)

Este equilibrio da [CN]/[HCN] < 0,01. Para la reacción (1) inversa se sugiere[17]

$$k_b = 3 \cdot 10^2 \, T^{2,45} \exp(-1.126/T) \qquad (4.4)$$

por lo cual la constante cinética para la reacción (1) directa puede calcularse como:

$$k_f = K \, k_b = 6{,}9 \cdot 10^2 \, T^{2,45} \exp(-9.466/T) \qquad (4.5)$$

La destrucción del CN para formar especies del tipo NH_i puede proceder a través de la formación intermedia de radicales libres OCN y HOCN. Reacciones posibles son[2,17]

(2) $CN + OH \rightarrow OCN + H$ $\quad k_f = 6{,}0 \cdot 10^{10} \, T^0 \exp(-0/T)$

(3) $OCN + H \rightarrow NH + CO$ $\quad k_f = 5{,}0 \cdot 10^{10} \, T^0 \exp(-0/T)$

La formación de NH ocurre también directamente a partir de HCN según

(4) $HCN + O \rightarrow OCN + H$ $\quad k_f = 1{,}4 \cdot 10^1 \, T^{2,64} \exp(-2.506/T)$

seguida de la reacción (3) y

(5) $HCN + O \rightarrow NH + CO$ $\quad k_f = 3{,}5 \cdot 10^0 \, T^{2,64} \exp(-2.506/T)$

En condiciones ricas en combustible la conversión también ocurre por la secuencia

(6) $HCN + OH \rightarrow HNCO + H$ $\quad k_f = 4{,}8 \cdot 10^8 \, T^0 \exp(-5.535/T)$

(7) $HNCO + H \rightarrow NH_2 + CO$ $\quad k_f = 2{,}0 \cdot 10^{10} \, T^0 \exp(-1.510/T)$

El grupo de especies NH_i tiende también hacia un equilibrio interno. La ref.[18] muestra una serie de 19 reacciones para esto. En base a consideraciones sobre rapideces de reacción y datos experimentales, las reacciones importantes son :[18,2]

(8)	$NH_3 + H \rightarrow NH_2 + H_2$	$k_f = 1{,}9 \cdot 10^8\ T^{0,67}\ \exp(-1.710/T)$
(9)	$NH_3 + OH \rightarrow NH_2 + H_2O$	$k_f = 4{,}0 \cdot 10^7\ T^{0,68}\ \exp(-550/T)$
(10)	$NH_3 + O \rightarrow NH_2 + OH$	$k_f = 8{,}1 \cdot 10^8\ T^{0,5}\ \exp(-0/T)$
(11)	$NH_2 + H \rightarrow NH + H_2$	$k_f = 1{,}4 \cdot 10^8\ T^{0,67}\ \exp(-2.165/T)$
(12)	$NH_2 + OH \rightarrow NH + H_2O$	$k_f = 3{,}0 \cdot 10^7\ T^{0,68}\ \exp(-655/T)$
(13)	$NH_2 + O \rightarrow NH + OH$	$k_f = 9{,}1 \cdot 10^8\ T^{0,5}\ \exp(-0/T)$
(14)	$NH + H \rightarrow N + H_2$	$k_f = 1{,}0 \cdot 10^9\ T^{0,68}\ \exp(-960/T)$
(15)	$NH + OH \rightarrow N + H_2O$	$k_f = 1{,}6 \cdot 10^9\ T^{0,56}\ \exp(-755/T)$
(16)	$NH + O \rightarrow N + OH$	$k_f = 8{,}5 \cdot 10^9\ T^{0,7}\ \exp(-50/T)$

Las especies NH_i reaccionan a su vez para formar NO o N_2 mediante[2]

(17)	$N + OH \rightarrow NO + H$	$k_f = 6{,}3 \cdot 10^8\ T^{0,5} \exp(-0/T)$
(18)	$N + O_2 \rightarrow NO + O$	$k_f = 6{,}3 \cdot 10^6\ T^{1}\ \exp(-3.150/T)$
(19)	$NH + OH \rightarrow NO + H_2$	$k_f = 1{,}6 \cdot 10^7\ T^{0,6}\ \exp(-750/T)$
(20)	$NH_2 + NO \rightarrow N_2 + H_2O$	$k_f = 7{,}9 \cdot 10^9\ T^{0} \exp(-0/T)$
(21)	$NH + NO \rightarrow N_2 + OH$	$k_f = 2{,}5 \cdot 10^9\ T^{0} \exp(-0/T)$
(22)	$N + NO \rightarrow N_2 + O$	$k_f = 2{,}0 \cdot 10^{10}\ T^{0} \exp(-0/T)$

El mecanismo global se cierra con la reacción de parte del NO formado para generar nuevamente CN y HCN, a través del ataque de C, CH y CH_2 (lo que ocurre sobretodo bajo condiciones ricas en combustible)[17]:

(23)	$C + NO \rightarrow CN + O$	$k_f = 6{,}6 \cdot 10^{10}\ T^{0} \exp(-0/T)$
(24)	$CH + NO \rightarrow HCN + O$	$k_f = 1{,}1 \cdot 10^{11}\ T^{0} \exp(-0/T)$
(25)	$CH_2 + NO \rightarrow HCNO + H$	$k_f = 1{,}4 \cdot 10^9\ T^{0} \exp(-553/T)$
(26)	$HCNO + H \rightarrow HCN + OH$	$k_f = 5{,}0 \cdot 10^{10}\ T^{0} \exp(-1510/T)$

Esto puede originar emisiones considerables de HCN en los gases de escape.

Una estimación simple de la fracción total de NH_3 que es convertido en NO puede obtenerse considerando[18] que a medida que el NH_3 pasa a través de los NH_i intermedios sufre reacciones irreversibles a alguna de las tres especies: N, NO, N_2, como se esquematiza en la fig. 4.1.

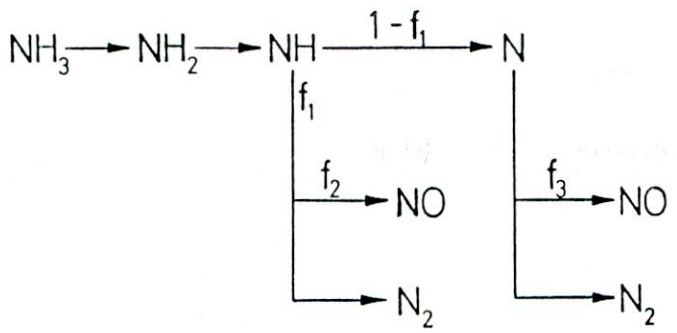


Fig. 4.1 Secuencia de reacción irreversible de NH_3 a N, NO, N_2

En la figura, los términos f_i representan:
f_1 : fracción molar de NH que forma NO o N_2 directamente.
f_2 : fracción de f_1 que forma NO
f_3 : fracción molar de N que forma NO

Estas fracciones pueden obtenerse fácilmente a partir del mecanismo de reacción, dividiendo la rapidez de producción de NO o NO + N_2 ,en estado estacionario, por la rapidez de consumo de N o NH, según el caso. El resultado es:

$$f_1 = \frac{k_{f19}[OH] + k_{f21}[NO]}{k_{f14}[H] + k_{f15}[OH] + k_{f16}[O] + k_{f19}[OH] + k_{f21}[NO]} \qquad (4.6)$$

$$f_2 = \frac{k_{f19}[OH]}{k_{f19}[OH] + k_{f21}[NO]} \qquad (4.7)$$

$$f_3 = \frac{k_{f17}[OH] + k_{f18}[O_2]}{k_{f17}[OH] + k_{f18}[O_2] + k_{f22}[NO]} \qquad (4.8)$$

La fracción molar NH_3 que es convertida en NO puede entonces calcularse como

$$f_{NH_3} = f_1 f_2 + (1-f_1)\, f_3 \qquad (4.9)$$

Si además se supone que el nitrógeno liberado en la pirólisis reacciona irreversiblemente a través de HCN, CN, OCN, HOCN hacia NH_3, entonces1a fracción molar del nitrógeno contenido en el carbón que se transforma en NO podría calcularse como

$$f_N = f_{Nv} [\, f_1 f_2 + (1-f_1)\, f_3 \,] \qquad (4.10)$$

con f_{Nv} la fracción molar de nitrógeno volatilizado, que puede igualarse a la fracción másica dada por (4.2). Como f_1 , f_2 y f_3 dependen de la concentración de NO, el procedimiento debe iterarse hasta obtener un valor estable para [NO].

UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA
BIBLIOTECA CENTRAL
Inventario: 992.06.02

4.2 Polutantes sulfurados

El principal contaminante formado por la oxidación del azufre contenido en el carbón es el SO_2. Pueden formarse también, aunque en proporción mucho menor, SO_3 y, en zonas ricas en combustible, H_2S, COS, CS_2 e hidrocarburos sulfurados. El azufre se encuentra tanto en el material orgánico del carbón como en piritas y sulfatos inorgánicos (importantes en la formación de cenizas). El contenido total varía entre 0 y 10% de la masa total del carbón. La oxidación del azufre es generalmente alta[23](85-90%) en combustión de carbón pulverizado y es relativamente independiente de las condiciones de combustión a temperaturas típicas. El azufre restante queda incluido en las cenizas.

La modelación de la conversión del azufre en fase gaseosa es, en el presente, un proceso tentativo, debido a que la composición de los volátiles sulfurados no se conocen con precisión. Resultados experimentales[2] indican que el H_2S es el volátil dominante, y puede postularse que otros volátiles sulfurados serán transformados en la pirólisis a H_2S, por lo que se considera a este compuesto como el punto de partida para la evaluación de la cinética química. Un mecanismo propuesto para la oxidación del H_2S a SO_2 por medio de HS y SO como especies intermedias es el siguiente:[19]

(1)	$H_2S + H \rightarrow HS + H_2$	$k_f = 1{,}2 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-861/T)$
(2)	$H_2S + OH \rightarrow H_2O + HS$	$k_f = 1{,}4 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-446/T)$
(3)	$H_2S + O \rightarrow OH + HS$	$k_f = 4{,}36 \cdot 10^{9}\ T^0\ \exp(-1.672/T)$
(4)	$HS + O \rightarrow SO + H$	$k_f = 3{,}56 \cdot 10^{11}\ T^0\ \exp(-323/T)$
(5)	$HS + H \rightarrow H_2 + S$	$k_f = 5{,}16 \cdot 10^{11}\ T^0\ \exp(-10{,}6/T)$
(6)	$SO + O_2 \rightarrow SO_2 + O$	$k_f = 1{,}8 \cdot 10^{8}\ T^0\ \exp(-2.819/T)$
(7)	$SO + OH \rightarrow SO_2 + H$	$k_f = 1{,}8 \cdot 10^{10}\ T^0\ \exp(-0/T)$
(8)	$SO + O + M \rightarrow SO_2 + M$	$k_f = 1{,}2 \cdot 10^{19}\ T^{-1,8}\ \exp(-0/T)$
(9)	$S_2 + O \rightarrow SO + S$	$k_f = 6{,}3 \cdot 10^{8}\ T^{0,5}\ \exp(-0/T)$
(10)	$S + O_2 \rightarrow SO + O$	$k_f = 6{,}3 \cdot 10^{8}\ T^{0,5}\ \exp(-0/T)$

Para la oxidación del SO_2 a SO_3 se sugiere[2] un mecanismo análogo al propuesto para la oxidación de NO a NO_2:

(11)	$SO_2 + O + M \rightarrow SO_3 + M$	$k_f = 2{,}4 \cdot 10^{11}\ T^0\ \exp(-1.260/T)$
(12)	$SO_3 + O \rightarrow SO_2 + O_2$	$k_f = 2{,}9 \cdot 10^{11}\ T^0\ \exp(-6.040/T)$
(13)	$SO_3 + H \rightarrow SO_2 + OH$	$k_f = (k[O] - k_{f12})/[H]$
		con $k = 6{,}5 \cdot 10^{11}\ T^0\ \exp(-5.434/T)$

En condiciones típicas de combustión de carbón pulverizado $[SO_3]/[SO_2]$ ≈0,01, siendo un poco mayor en las regiones más frías de la cámara de combustión.

4.3 Hollín

El hollín se forma a partir de hidrocarburos volátiles en la región rica en combustible que rodea a las partículas de carbón. Esta constituido principalmente por carbono (más de 90% en masa) pero puede incluir otros elementos como hidrógeno y oxígeno.

En la formación del hollín se distinguen generalmente tres etapas[20]:

- nucleación (transformación desde un sistema molecular a un sistema de partículas).
- crecimiento a partículas esféricas de 0,01-0,05 [μm] de diámetro.
- aglomeración de estas unidades esféricas para formar cadenas.

De estos tres pasos, la nucleación es el menos entendido. Este proceso demuestra ser sumamente complejo y su conocimiento a nivel de mecanismos de reacción y cinética química es bastante incompleto hasta el momento, existiendo numerosas teorías y mecanismos propuestos: teorías del carbono atómico, del C_2 del C_3, del acetileno, de la polimerización de hidrocarburos, de la descomposición superficial, de la reacción de Boudouard, del poliacetileno, etc. De estas teorías, una de las más atractivas parece ser la que explica la formación de moléculas complejas con alto contenido de carbono a través de poliacetilenos.

La ref. [20] entrega un mecanismo de reacción compatible con la formación de hollín mediante poliacetilenos, incluyendo las constantes cinéticas. El mecanismo se resume en la fig. 4.2 en forma esquemática para ilustrar la teoría.

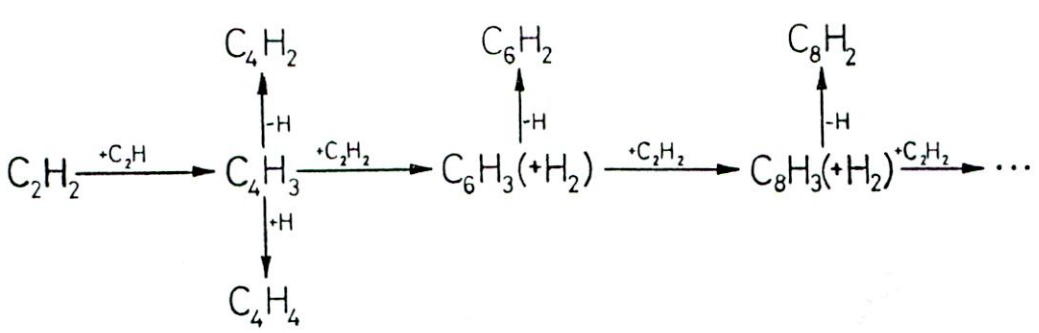


Fig. 4.2 Nucleación mediante poliacetilenos.

A medida que moléculas más grandes se forman, el tamaño medio de los radicales continua aumentando, y radicales más grandes reaccionan entre sí y con poliacetilenos de orden más alto formando moléculas más grandes aún. Sin embargo, una continuación de esta serie no puede llevar hasta hollín, ya que éste no es una gigantesca molécula de cadena lineal sino una estructura policíclica[20]. Además, los policetilenos no aumentan suficientemente rápido como para poder explicar la formación casi instantánea del hollín. Con este mecanismo se obtienen tiempos de nucleación órdenes de magnitud mayores que los observados (se han registrado tiempos característicos de formación de 10^{-4}[s]).

Otros mecanismos que se basan en la formación de moléculas complejas mediante hidrocarburos policíclicos aromáticos tampoco son aceptables[20] por cuanto se obtiene una continuación en el aumento de tales especies cuando la formación del hollín ha cesado.

El mecanismo que mejor explica las observaciones experimentales es el que combina los mecanismo anteriores de radicales libres neutros con un mecanismo iónico. De esta forma se obtienen iones complejos que se reordenan rápidamente para formar estructuras policíclicas. Las reacciones involucradas pueden verse en la ref.[20]; algunos pasos del mecanismo se resumen en la fig. 4.3. No obstante, este modelo no ha sido suficientemente desarrollado como para poder obtener predicciones cuantitativas.

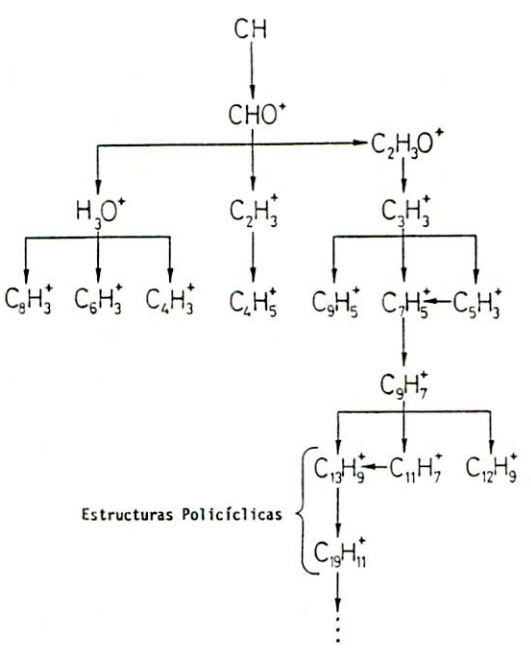


Fig. 4.3. Mecanismo iónico de nucleación.

4.4 Polutantes inorgánicos

El contenido de material mineral inorgánico en el carbón es de un 5-20% en masa, y es una fuente importante de polución. La mayor parte de este material mineral forma cenizas volantes durante la combustión. La distribución de tamaños de tales cenizas volantes es dual[2]. Hay un rango de tamaños relativamente grandes, que está estrechamente relacionado con la distribución de tamaños del carbón pulverizado original (diámetros medios típicos varían entre 5 y 20[μm]). Existe también un rango de tamaños submicroscópicos (menos de 0,1 [μm]), el cual es significativo en las emisiones contaminantes ya que escapa a la acción de sistemas precipitadores y tiende a concentrar metales pesados, tales como Cd, As, Se, Pb, Ni, Zn, Sb, y también azufre.

Las condiciones en prácticamente todos los sistemas de combustión de carbón conducen también a la formación de vapores de especies inorgánicas en concentraciones significativas en los gases de escape[21] (especialmente a altas temperaturas). Dichos vapores pueden incluir SiO, SiO_2, MgO, óxidos de metales pesados, Na_2SO_4, K_2SO_4, NaCl y otros. Estas especies pueden condensarse sobre la superficie de las cenizas mayores al enfriarse los gases de escape. Bajo ciertas condiciones la fase gaseosa puede llegar a estar suficientemente supersaturada con respecto a algunos de estos compuestos, ocurriendo la nucleación homogénea de partículas submicroscópicas en gran cantidad. Sin embargo, la mayor parte de la masa de las cenizas se encuentra en el rango de tamaños mayores. La desvolatilización de las partículas de carbón y combustión inicial del coque producen, en la mayoría de los carbones, partículas de coque de estructura frágil que contienen las inclusiones minerales. Las inclusiones de cenizas fundidas tienden a fusionarse más que a vaporizarse apreciablemente a medida que el coque se quema. Esta aglomeración se inicia principalmente cuando la partícula se ha quemado en un 75%. En algún instante del último 25% del quemado (se sugiere[2] un 90%) la estructura del coque se fractura y la partícula se rompe en varios fragmentos. Se considera que cada partícula de carbón bituminoso forma en promedio 5 partículas de ceniza, mientras que los lignitos producen 3 partículas[21].

Aunque en base másica las partículas de ceniza grandes son el tipo dominante, en base numérica lo son las submicroscópicas. Para partículas entre 8 y 12 [μm] los valores usuales de densidad numérica

fluctúan entre $4,8 \cdot 10^8$ y $1,6 \cdot 10^9$ [m^{-3}]; para partículas de 0,1 [μm], en cambio, la densidad numérica es de 10^{10} - 10^{13} [m^{-3}].

5. SOLUCION DE LAS ECUACIONES TERMOQUIMICAS

5.1 Introducción.

Todas las ecuaciones que han de resolverse en un sistema euleriano vistas en los capítulos anteriores (vale decir, las ecuaciones de Navier-Stokes, las de modelo de turbulencia, las termoquímicas y la de continuidad) pueden expresarse en la forma general compacta

$$\nabla \cdot (\rho \, \mathbf{v}_g \, \phi) \; - \; \nabla \cdot (\Gamma_\phi \; \nabla \phi) = S^\phi \qquad (5.1)$$

En ésta se plantea la conservación de la variable dependiente generalizada ϕ, igualando su transporte neto por convección y difusión desde el VC a la fuente correspondiente de ϕ en él. Incluso las ecuaciones del modelo de radiación, como se verá en el siguiente capítulo, pueden escribirse también como una forma particular de la ecuación (5.1), aunque, obviamente, la naturaleza física del mecanismo de transporte es completamente diferente. El sistema global de ecuaciones eulerianas de la modelación (sin incluir las de radiación) y las constantes involucradas se resumen en la tabla 5.1. El caso para ϕ=1 corresponde a la ecuación de continuidad.

No es posible actualmente obtener una solución analítica de este sistema de ecuaciones diferenciales, por lo que debe resolverse numéricamente. El método adoptado en esta modelación para tal efecto es el de diferencias finitas, empleándose el esquema de volumen de control de Patankar-Spalding[27], con mallas de discretización desplazadas para las variables u y v, según se ilustra en la fig. 5.1 y 5.2. Es así como u y v, para el punto P dado, son calculadas en los puntos w y s respectivamente, mientras que todas las demás variables se calculan en el punto P. Para mayores detalles véanse las ref. [5], [7], [22].

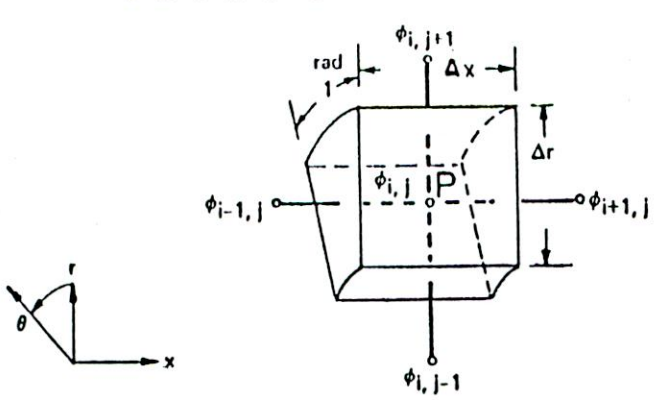
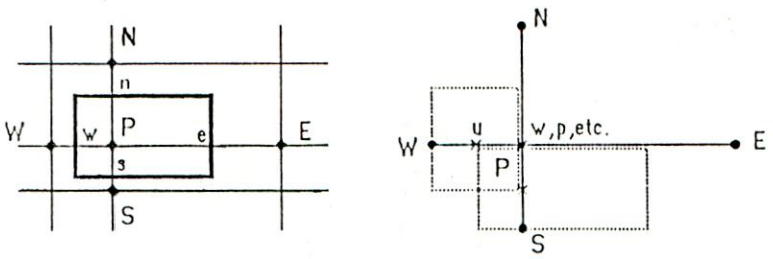


Fig. 5.1. Volumen de control (celda computacional) en torno al nodo (i , j) (punto P)



a b

Fig. 5.2 a) Denominación de nodos vecinos a P
b) Volúmenes de control desplazados para u y v.

tabla 5.1 Términos de las ecuaciones de conservación eulerianas.

ϕ	Γ_ϕ	S^ϕ
		(Ec.fluidodinámicas)
u	μ_{eff}	$-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu_{eff}\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial v}{\partial x}\right)+f_x$
v	μ_{eff}	$-\frac{\partial p}{\partial r}+\rho\frac{w^2}{r}-2\mu_{eff}\frac{v}{r^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu_{eff}\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial v}{\partial r}\right)+f_r$
w	μ_{eff}	$-\rho\frac{v\,w}{r}-\frac{w}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r\mu_{eff})+f_\theta$
k	μ_{eff}/σ_k	$G-C_D\,\rho\,\varepsilon$
ε	$\mu_{eff}/\sigma_\varepsilon$	$\frac{1}{k}(C_1\varepsilon\,G-C_2\rho\varepsilon^2)$
1	0	${}_pS^m$
		(Ec.termoquímicas)
h	μ_{eff}/σ_h	${}_RS^h-\nabla\cdot(\tau\cdot v_g)-\nabla\cdot(\rho v_g\|v_g\|^2/2)+{}_pS^h$
σ_i	μ_{eff}/σ_s	$-r_i+{}_pS^{\sigma_i}$; i=1,...,NS

C_D	C_μ	C_1	C_2	σ_k	σ_ε	σ_h	σ_s
1,00	0,09	1,44	1,92	1,00	1,217	0,885	1,3

5.2 Discretización de las ecuaciones

La versión discretizada en diferencias finitas de la ecuación (5.1) para una celda dada se obtiene integrando dicha ecuación sobre

el volumen de la celda con ayuda del teorema del valor medio. El resultado es una ecuación de la forma

$$(a_E+a_W+a_N+a_S+C_E-C_W+C_N-C_S)\,\phi_P = a_E\phi_E+a_W\phi_W+a_N\phi_N+a_S\phi_S+S^{\phi}\,\Delta V \qquad (5.2)$$

Los coeficientes C_I (I = E,W,N,S) corresponde a los coeficientes de convección desde o hacia los nodos vecinos, definidos más adelante; los a_I son los coeficientes totales de transporte (convección + difusión), y se calculan, en este trabajo, de acuerdo al esquema híbrido[5] :

$$a_I = \begin{cases} D_I - 1/2C_I & ; |Pe| < 2 \\ 0 & ; |Pe| \geq 2 \\ -C_I & ; |Pe| \leq -2 \end{cases} \quad ; I= E,N \qquad (5.3)$$

$$a_I = \begin{cases} D_I + 1/2C_I & ; |Pe| < 2 \\ C_I & ; |Pe| \geq 2 \\ 0 & ; |Pe| \leq -2 \end{cases} \quad ; I= W,S \qquad (5.4)$$

donde Pe es el número de Peclet para la celda, dado por

$$Pe = \begin{cases} \rho u \Delta x/\Gamma_{\phi} & ; \ E;W \\ \rho v \Delta r/\Gamma_{\phi} & ; \ N;S \end{cases} \qquad (5.5)$$

el cual se evalúa en la frontera que corresponda (e,w,n,s) de la celda. Los coeficientes de convección y difusión se definen como

$$C_I = \begin{cases} \rho_i u_i A_i & ; \ I=E;W \ ; \ i=e;w \\ \rho_i v_i A_i & ; \ I=N;S \ ; \ i=n;s \end{cases} \qquad (5.6)$$

$$D_I = \begin{cases} \Gamma_{\phi i} A_i/\Delta x_i & ; \ I=E;W \ ; \ i=e;w \\ \Gamma_{\phi i} A_i/\Delta r_i & ; \ I=N;S \ ; \ i=n;s \end{cases} \qquad (5.7)$$

con A_i el área de la frontera correspondiente.

La práctica usual es linealizar el término fuente respecto a la variable dependiente:

$$S^{\phi} = Su^{\phi} + Sp^{\phi}\,\phi_P \qquad (5.8)$$

Por otra parte, la integración en volumen de la ecuación de continuidad (2.6) da

$$C_E - C_W + C_N - C_S = {}_pS^m \Delta V \qquad (5.9)$$

por lo tanto, al reemplazar (5.8) y (5.9) en la ecuación (5.2), ésta puede escribirse en la forma estándar

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + Su^{\phi}\Delta V \qquad (5.10)$$

con $$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - Sp^{\phi}\Delta V \; (+ {}_pS^m\Delta V) \qquad (5.11)$$

Al plantear la ecuación (5.10) por cada volumen de control se obtiene un sistema de ecuaciones lineales para la variable ϕ sobre toda la malla de discretización, el cual es resuelto por el método línea a línea y el algoritmo TDMA (matriz tridiagonal) en dirección radial, avanzado en dirección axial y usando para ϕ_W el valor calculado más recientemente[7].

La linealización del término fuente da resultados satisfactorios de convergencia cuando la variación local de ϕ_P depende más fuertemente de la misma variable ϕ en los nodos vecinos que de las otras variables en el mismo punto. Tal es el caso de las ecuaciones fluidodinámicas pero no el de las termoquímicas. En estas últimas predomina el fuerte acoplamiento no lineal entre la composición del gas y su temperatura, de modo que para una especie k, σ_{kP} depende más intensamente de los restantes σ_i y T en dicho nodo, que del valor de σ_k en los nodos adyacentes. A su vez, T queda determinado principalmente por la composición local del gas, como se discute en 3.3. Como consecuencia, las ecuaciones termoquímicas tienden a diverger al ser planteadas como ecuaciones linealizadas, por lo que se ha postulado que[2]:

a) estas ecuaciones deben resolverse punto a punto simultáneamente.

b) debido a las grandes no-linealidades, el uso de información diferencial puede resultar muy útil para lograr convergencia rápida cuando existen elevados gradientes de σ_i o T. Aún así, en el desarrollo anterior[9] (código COMBUS) se optó, como una primera etapa, por resolver las ecuaciones de conservación de especies, con el mecanismo de combustión simplificado, en forma linealizada, por ser un método más manejable y tradicional. Además, en dicho caso, por permanecer constante la distribución de temperatura del gas, parte

de la causa de inestabilidad desaparece. Sin embargo, en el presente trabajo no es así, lo que hace presumir la poca factibilidad de acoplar la ecuación de energía mediante el método de ecuaciones linealizadas, hecho que pudo comprobarse tal como se discute en el siguiente punto.

5.3. Solución como ecuaciones linealizadas.

La posibilidad de resolver la ecuación de energía en forma linealizada es atractiva de estudiar, ya que en esta forma su acoplamiento a las restantes ecuaciones del modelo es directo, pudiendo emplearse las mismas subrutinas ya disponibles en el programa para resolver el sistema de ecuaciones generado.

La linealización de las ecuaciones de conservación de especies se efectúa en el código COMBUS en la forma

$$Su^{\sigma_i} = {}_pS^{\sigma_i} + r_{Ci} \tag{5.12}$$

$$Sp^{\sigma_i} = -\frac{r_{Di}}{\sigma_i} \tag{5.13}$$

con r_{Di} y r_{Ci} calculados según (3.14) y (3.15).

Para la ecuación de energía el término fuente total ha de incluir fuentes radiativa, debido a las partículas, de disipación viscosa y de energía cinética, es decir

$$S^h = {}_RS^h + {}_pS^h + {}_\Phi S^h + {}_{EC}S^h \tag{5.14}$$

donde se han definido

$${}_\Phi S^h = - \nabla \cdot (\tau \cdot v_g) \tag{5.15}$$

$${}_{EC}S^h = - \nabla \cdot (\rho\, v_g ||v_g||^2/2) \tag{5.16}$$

${}_pS^h$ ya fue definido por la ecuación (3.60). La fuente radiativa ${}_RS^h$ se trata en el siguiente capítulo. Puesto que ninguna de estas fuentes depende en forma explícita de h, lo más indicado es hacer

$$Su^h = S^h \tag{5.17}$$

$$Sp^h = 0 \tag{5.18}$$

Adicionalmente, para mejorar la estabilidad numérica del método se incluye (excepto para σ_i) una fuente falsa, que no tiene efecto sobre la solución final y cuya magnitud para la n-ésima iteración es[5]

$$S^{\phi}_{falsa} = \frac{1}{\Delta V} \max\{ \dot{m}_{nt} , 0\} \, (\phi_P^{(n-1)} - \phi_P^{(n)}) \qquad (5.19)$$

siendo $\phi_P^{(n-1)}$ el valor obtenido en la iteración anterior y $\dot{m}_{nt}$ el flujo másico neto que sale de la celda (téngase presente que durante la mayor parte del proceso iterativo el campo de flujo no cumple continuidad, por lo que el $\dot{m}_{nt}$ calculado puede tomar cualquier signo, y no ser necesariamente igual a ${}_pS^m$ o cero, como debe ser al cumplirse continuidad). Luego, los coeficientes de S^h linealizado quedan como

$$Su^h = {}_RS^h + {}_pS^h + {}_{\Phi}S^h + {}_{EC}S^h + \frac{1}{\Delta V} \max\{ \dot{m}_{nt} , 0\} \, h_p^{(n-1)} \qquad (5.20)$$

$$Sp^h = -\frac{1}{\Delta V} \max\{ \dot{m}_{nt} , 0\} \qquad (5.21)$$

El restringir $\dot{m}_{nt}$ sólo a valores positivos tiene por objeto impedir que pueda darse $Sp^{\phi} > 0$, lo cual contraviene una de las condiciones básicas para que el método sea numéricamente estable.

Para la solución de las ecuaciones termoquímicas mediante esta alternativa se resuelven una a una las ecuaciones discretizadas de especies sobre todo el campo, secuencia que es iterada hasta lograr convergencia, y luego se resuelve, mediante el mismo algoritmo, la ecuación de energía. Esto último entrega el campo de entalpía del gas, a partir del cual se obtiene el de temperatura resolviendo para cada nodo la ecuación formada por (3.10) y (3.11):

$$R \sum_{i=1}^{NS} \sigma_i \left(\sum_{n=1}^{5} Z_{in} \frac{T^n}{n} + Z_{i6} \right) = h \qquad (5.22)$$

mediante algún método apropiado (se usó el regula-falsi). Este proceso es acoplado además con la resolución de las ecuaciones fluidodinámicas como se muestra esquemáticamente en la fig. 5.3 (se muestra sólo el flujograma general del loop de acople ec. fluidodinámicas - ec. de especies - ec. de energía, el cual a su vez va

anidado dentro de un loop mayor que se encarga del acoplamiento con las partículas).

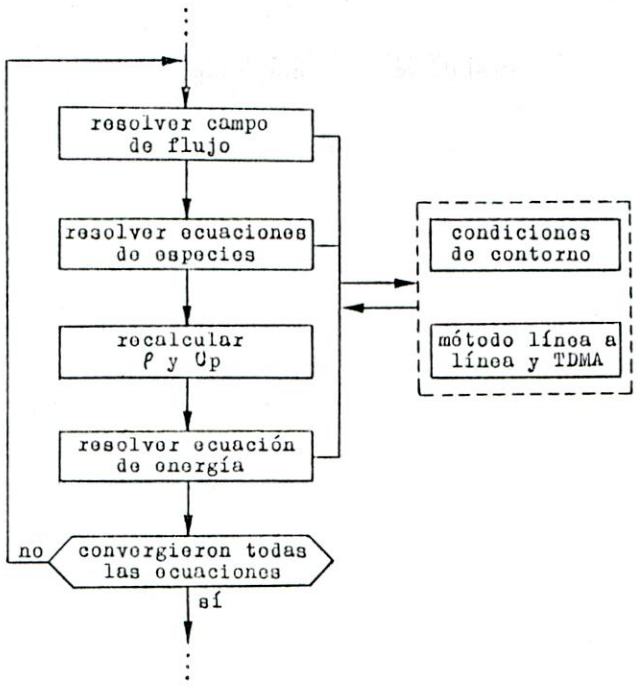


Fig. 5.3 Acople de ec. flujo - ec. especies - ec. energía linealizadas.

El criterio de convergencia empleado para cada variable es considerar solución convergida cuando la suma de los residuos, sobre todos los nodos, de la ecuación discretizada correspondiente es menor que un cierto porcentaje del flujo de entrada de dicha variable al campo. Se exige aquí una precisión del 1,5% para la solución final, aunque las primeras iteraciones se hacen con un criterio más relajado (15%), de modo que al principio se muevan todas las variables en la dirección de la solución final.

El procedimiento dado por la fig. 5.3 resultó completamente divergente, incluso para valores leídos de soluciones previas del código COMBUS. La divergencia empieza a manifestarse en forma progresiva en las ecuaciones de especies, trasmitiéndose a la ecuación de energía y al campo de flujo. Otras posibilidades, como incluir la ec. de energía sólo en la iteración de alta presición, para tener como entrada una composición más realista del gas, o bien situar la resolución de la ec. de energía en un loop exterior al de acople flujo-especies, para evitar un reforzamiento mutuo de las inestabilidades, resultaron también divergentes.

En conclusión, la resolución de las ecuaciones termoquímicas con la linealización de los términos fuente demuestra ser, como era de esperarse, sumamente inestable, por lo cual el acoplamiento de la ecuación de energía debe efectuarse mediante la resolución simultánea punto a punto de las ecuaciones termoquímicas.

5.4 Resolución simultánea punto a punto.

En el procedimiento anterior se obtiene la distribución de una única variable a la vez sobre todos los puntos (celdas) de la malla, manteniendo constantes las demás variables en sus valores más recientes calculados. Así, una variable no será afectada por las variaciones de otras que son calculadas a continuación de ella hasta una nueva repetición de la secuencia completa. En cambio, en el método que aquí se expone las ecuaciones de especies y de energía son resueltas simultáneamente en cada punto, manteniendo constantes los valores en los nodos vecinos, con lo cual se asegura que la variación de cada variable influya inmediatamente en el valor de las otras, pues todos las ecuaciones deben converger localmente al mismo tiempo. De esta forma se avanza punto a punto sobre la malla resolviendo el sistema de ecuaciones para las variables locales.

Lo anterior se lleva a cabo definiendo, para cada ecuación a resolver simultáneamente, un funcional f_ϕ que corresponde a dicha ecuación igualada a cero, o sea

$$f_\phi = \nabla \cdot (\rho \, v_g \, \phi) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) - S^\phi = 0 \qquad (5.23)$$

Además, se recomienda tomar a σ_m como una variable independiente[2], por lo que debe incluirse un funcional adicional para esta variable, obtenido a partir de la ecuación de definición de σ_m, (3.8), igualada a cero:

$$f_m = \sum_{i=1}^{NS} \sigma_i - \sigma_m \qquad (5.24)$$

Por consiguiente, para las ecuaciones termoquímicas se debe plantear en cada punto el sistema de NS + 2 ecuaciones no lineales

$$\begin{aligned}
f_{\sigma_i} &= f_1(\sigma_i, \ldots, \sigma_{NS}, \sigma_m, T) = 0 \\
&\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\
f_{\sigma_{NS}} &= f_{NS}(\sigma_i, \ldots, \sigma_{NS}, \sigma_m, T) = 0 \\
f_m &= f_{NS+1}(\sigma_i, \ldots, \sigma_{NS}, \sigma_m, T) = 0 \\
f_T &= f_{NS+2}(\sigma_i, \ldots, \sigma_{NS}, \sigma_m, T) = 0
\end{aligned} \qquad (5.25)$$

Esta es sólo una representación general, y no significa que cada funcional dependa necesariamente de las NS+2 variables. Adviértase también que la variable asociada a la ecuación de energía es, en este caso, la temperatura del gas y no su entalpía, ya que los funcionales de especies dependen explícitamente de T y no de h.

Es claro que si la ecuación (5.23) se integra sobre el volumen de la celda se obtendrá la ecuación de discretización (5.2) igualada a cero:

$$f_\phi \Delta V = a_P\phi_P - a_E\phi_E - a_W\phi_W - a_N\phi_N - a_S\phi_S - S^\phi \Delta V \qquad (5.26)$$

donde ahora $$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + C_E - C_W + C_N - C_S \qquad (5.27)$$

La ecuación (5.26) se puede reescribir convenientemente como

$$f_\phi = \frac{a_P}{\Delta V}\left[\ \phi_P - \frac{a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S}{a_P}\ \right] - S^\phi \qquad (5.28)$$

Definiendo $$B_P = \frac{a_P}{\Delta V} \qquad (5.29)$$

y $$\phi^* = \frac{1}{a_P}\sum_{i=E,W,N,S} a_i\phi_i \qquad (5.30)$$

el funcional queda finalmente en la forma

$$f_\phi = B_P\,(\phi_P - \phi^*) - S^\phi \qquad (5.31)$$

El parámetro B_P se suele designar como constante de tiempo de la celda, pues $B_P \to \infty$ implica un tiempo de residencia nulo en ella, mientras que $B_P = 0$ corresponde a un tiempo de residencia infinito. En el primer caso se trata de un proceso de mezcla sin reacción, en el segundo, de una solución de equilibrio químico. Debido a que los coeficientes de difusión para las ecuaciones de especies son diferentes de los de la ecuación de energía, las constantes de tiempo para los funcionales de especies y energía también lo son. Por lo tanto, para mayor claridad se denotarán como B_P^σ y B_P^h respectivamente.

5.4.1 Funcionales de especies

De acuerdo a lo anterior, para cada especie i se tiene un funcional

$$f_i = B_P^{\sigma}(\sigma_{iP} - \sigma_i^*) + \sum_{j=1}^{J\,J}(\alpha'_{ij} - \alpha''_{ij})(r_{fj} - r_{bj}) - {}_pS^{\sigma_i} \quad ; i=1,...,NS \qquad (5.32)$$

con

$$\sigma_i^* = \frac{1}{a_P} \sum_{k=E,W,N,S} a_k \sigma_{ik} \qquad (5.33)$$

5.4.2 Funcional de energía

Para la ecuación de energía, el funcional es

$$f_T = B_P^h\,(h_p - h^*) - S^h \qquad (5.34)$$

con S^h según la tabla 5.1 y

$$h^* = \frac{1}{a_P} \sum_{i=E,W,N,S} a_i h_i \qquad (5.35)$$

Debido a la enorme diferencia de magnitud entre los σ_i y la entalpía del gas (al menos 7 órdenes de magnitud), la formulación del funcional de energía en la forma (5.34) no es numéricamente conveniente (durante el proceso de solución se daría que $f_T >> f_i$ aún cuando el error relativo en f_T fuera menor). Esto es evitado dividiendo (5.35) por B_P^h y RT con lo cual f_T resulta del orden de los demás funcionales. Además, como este funcional debe plantearse para T como variable, se reemplaza h_P por la ecuación (5.22) que relaciona la entalpía del gas con su temperatura. El funcional de energía es, por lo tanto

$$f_T = \frac{1}{RT} \sum_{n=1}^{N\,S} \sigma_n\, h_n(T) - \frac{h^*}{RT} + \frac{Q}{RT} \qquad (5.36)$$

donde

$$Q = - S^h / B_P^h \qquad (5.37)$$

y $h_n(T)$ es la función polinomial de T definida por (3.11).

5.4.3 Método de solución

El sistema (5.25) puede denotarse en forma compacta como

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{5.38}$$

con

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_{NS+2}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \tag{5.39}$$

y $$\mathbf{x} = \{x_1, \ldots, x_{NS+2}\} = \{\sigma_1, \ldots, \sigma_{NS}, \sigma_m, T\} \tag{5.40}$$

Para resolver este sistema se debe corregir iterativamente el valor estimado para $\mathbf{x}$ hasta converger a la solución. Esto significa que a partir de la estimación obtenida en la n-ésima iteración, una nueva estimación es calculada como

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \Delta\mathbf{x}^{(n)} \tag{5.41}$$

donde $\Delta\mathbf{x}$ es el vector de corrección

$$\Delta\mathbf{x} = \{\Delta\sigma_1, \ldots, \Delta\sigma_{NS}, \Delta\sigma_m, \Delta T\} \tag{5.42}$$

es decir, para cada variable se ha de calcular su correspondiente término de corrección, con lo cual el problema se traduce en obtener $\Delta\mathbf{x}$. Por otra parte, para evitar la generación de números negativos en el transcurso de la iteración se introduce el cambio de variable $x \rightarrow \ln x$ de modo que soluciones negativas para $\ln x_k$ aún resultan positivas para x_k. Así se tiene

$$\ln\mathbf{x}^{(n+1)} = \ln\mathbf{x}^{(n)} + \eta\ \Delta\ln\mathbf{x}^{(n)} \tag{5.43}$$

donde se ha introducido un coeficiente de relajación η, cuyo cálculo se describe posteriormente, para evitar divergencia por correcciones demasiado grandes. Por lo tanto, la corrección de las variables se efectua en definitiva como

$$x_k^{(n+1)} = x_k^{(n)} \exp(\eta\ \Delta\ln x_k^{(n)}) \qquad ; k=1,...,NS+2 \tag{5.44}$$

Para obtener $\Delta \ln \mathbf{x}$ el método usualmente empleado es el de Newton-Raphson[2,8,29]. Con éste, las variables de corrección se determinan a partir del sistema de ecuaciones lineales

$$\mathbf{J} \cdot \Delta \ln \mathbf{x} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}) \tag{5.45}$$

siendo $\mathbf{J}$ la matriz jacobiana de los funcionales respecto a las variables $\ln x_k$, i.e.

$$J_{ik} = \frac{\partial f_i}{\partial \ln x_k} \quad ; i,k=1,...,NS+2 \tag{5.46}$$

La ecuación (5.45) se deduce en el anexo B y puede resolverse por los métodos tradicionales por sistemas lineales, tras lo cual una nueva estimación de $\mathbf{x}$ es calculada, según (5.44), y el proceso se repite hasta lograr convergencia. Para tal resultado, se requiere una estimación inicial de $\mathbf{x}$ muy cercana a la solución final. Un método más eficiente, por cuanto admite estimaciones menos precisas, es el de Glasmacher-Sommer[30], que combina el método del gradiente con el de Newton-Raphson. Este es el método que se utiliza en este trabajo.

El método del gradiente consiste básicamente en definir la función

$$Q(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{NS+2} f_i^2(\mathbf{x}) \tag{5.47}$$

de manera que resolver el sistema (5.38) es equivalente a resolver

$$Q(\mathbf{x}) = 0 \tag{5.48}$$

En este caso el vector de corrección se calcula como (ver anexo B):

$$\Delta \mathbf{x}^{(n)} = - \frac{Q(\mathbf{x}^{(n)})}{\| \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \|^2} \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{5.49}$$

En el método de Glasmacher-Sommer se emplea una versión modificada del método del gradiente, la cual corrige $\mathbf{x}$ en dos pasos por iteración. Efectuando el cambio a variable logarítmica e incluyendo el coeficiente de relajación η, propio de este tipo de modelación, la secuencia de iteración es:

- primer paso:

$$x_k^{(n+1)} = x_k^{(n)} \exp(\eta\ \alpha\ \Delta \ln x_k^{(n)}) \tag{5.50}$$

donde $$\Delta \ln \mathbf{x}^{(n)} = - \frac{Q(\mathbf{x}^{(n)})}{\| \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \|^2} \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{5.51}$$

en este caso ∇Q se evalúa respecto a las variables $\ln x_k$, de modo que

$$\nabla Q = 2\mathbf{f}^T \cdot \mathbf{J} \tag{5.52}$$

y, además

$$\alpha = \frac{3P_0 - 4P_1 + P_2}{4(P_0 - 2P_1 + P_2)} \tag{5.53}$$

con

$$P_0 = \| \nabla Q(\mathbf{x}_0) \| \quad ; \quad \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}^{(n)} \tag{5.54}$$

$$P_1 = \| \nabla Q(\mathbf{x}_1) \| \quad ; \quad \mathbf{x}_1 = \{x_k^{(n)} \exp(\eta\ \frac{1}{2} \Delta \ln x_k^{(n)})\} \tag{5.55}$$

$$P_2 = \| \nabla Q(\mathbf{x}_2) \| \quad ; \quad \mathbf{x}_2 = \{x_k^{(n)} \exp(\eta\ \Delta \ln x_k^{(n)})\} \tag{5.56}$$

- segundo paso:

$$x_k^{(n+2)} = x_k^{(n+1)} \exp(\eta\ \beta\ \Delta \ln x_k^{(n+1)}) \tag{5.57}$$

donde $$\Delta \ln \mathbf{x}^{(n+1)} = - \frac{Q(\mathbf{x}^{(n+1)})}{\| \nabla Q(\mathbf{x}^{(n+1)}) \|^2} \nabla Q(\mathbf{x}^{(n+1)}) \tag{5.58}$$

$$\beta = \frac{3Q_0 - 4Q_1 + Q_2}{4(Q_0 - 2Q_1 + Q_2)} \tag{5.59}$$

con

$$Q_0 = Q(\mathbf{x}_0) \quad ; \quad \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}^{(n+1)} \tag{5.60}$$

$$Q_1 = Q(\mathbf{x}_1) \quad ; \quad \mathbf{x}_1 = \{x_k^{(n+1)} \exp(\eta\ \frac{1}{2} \Delta \ln x_k^{(n+1)})\} \tag{5.61}$$

$$Q_2 = Q(\mathbf{x}_2) \quad ; \quad \mathbf{x}_2 = \{x_k^{(n+1)} \exp(\eta\ \Delta \ln x_k^{(n+1)})\} \tag{5.62}$$

En seguida se hace $\mathbf{x}^{(n)} = \mathbf{x}^{(n+2)}$ y se repite el proceso hasta que $Q < \varepsilon_Q$, siendo ε_Q el límite de precisión fijado para el método de gradiente, tras lo cual se cambia al método de Newton-Raphson, resolviéndose el

sistema (5.45) mediante eliminación gaussiana con pivote. La iteración prosigue de esta manera hasta que

$$\left[\sum_{k=1}^{NS+2}(\Delta \ln x_k)^2\right]^{1/2} < \varepsilon_x \qquad (5.63)$$

con ε_x el límite de precisión para considerar solución convergida. En este trabajo se utiliza

$$\varepsilon_x = \varepsilon_Q = 0{,}005 \qquad (5.64)$$

(En rigor, ésta es sólo la secuencia básica; el algoritmo en sí en mucho más complicado, en lo que concierne a la combinación de ambos métodos)

Para valores suficientemente pequeños de $\Delta \ln x_k$ (como los que se tienen cerca de la solución), éstos se pueden aproximar a la variación relativa de la variable correspondiente (véase anexo B):

$$\Delta \ln x_k^{(n)} \approx \frac{\Delta x_k^{(n)}}{x_k^{(n)}} \qquad (5.65)$$

y como los $\Delta \ln x_k^{(n)}$, para las 12 variables que se resuelven, son similares entre sí, el criterio (5.63) equivale aproximadamente a exigir convergencia dentro de un 0,15% de fluctuación en las variables.

- **Coeficiente de relajación**

Para el coeficiente de relajación η se emplea un valor "autoajustante" a la magnitud de las correcciones, según el esquema de Gordon y McBride[2,8]:

a) para T, σ_m y los σ_k tales que $\sigma_k/\sigma_m > 10^{-8}$ y $\Delta \ln \sigma_k > 0$ se define

$$\eta_1 = 2/\max(\,|\Delta \ln T|\,,\,|\Delta \ln \sigma_m|\,,\,|\Delta \ln \sigma_k|\,) \qquad (5.66)$$

Esto limita a las variables a no aumentar por más de un factor exp(2) en cualquier iteración.

b) Para los σ_k tales que $\sigma_k/\sigma_m \leq 10^{-8}$ y $\Delta \ln \sigma_k > 0$ se define

$$\eta_2 = \min\left|\frac{\ln(10^{-4}) - \ln(\sigma_k/\sigma_m)}{\Delta \ln \sigma_k - \Delta \ln \sigma_m}\right| \qquad (5.67)$$

Esto restringe a las fracciones molares $y_k \leq 10^{-8}$ ($y_k = \sigma_k/\sigma_m$) a no aumentar a más de 10^{-4} en una sola iteración.
c) El coeficiente de relajación se escoje entonces según

$$\eta = \min(\eta_1 , \eta_2 , 1) \tag{5.68}$$

η es recalculado en cada iteración. Por lo tanto, en valores lejanos a la solución, $\eta < 1$ y la corrección de las variables es relajada proporcionalmente, mientras que para valores suficientemente próximos a la solución, $\eta=1$ y la iteración prosigue en forma directa.

- **Derivadas parciales:**

Las derivadas parciales de las funcionales, que componen la matriz **J** , se deducen en el anexo C, resultando:
funcionales de especies:

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln \sigma_k} = B_P^{\sigma} \sigma_k \delta_{ik} + \sum_{j=1}^{JJ} (\alpha'_{ij} - \alpha''_{ij})(\alpha'_{kj} r_{fj} - \alpha''_{kj} r_{bj}) \; ; \; i,k = 1,...,NS \tag{5.69}$$

donde δ_{ik} es el delta de Kronecker

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln \sigma_m} = \sum_{j=1}^{JJ} (\alpha'_{ij} - \alpha''_{ij})(n''_j r_{bj} - n'_j r_{fj}) \qquad ; i = 1,...,NS \tag{5.70}$$

con n'_j y n''_j las sumatorias de los coeficientes estequiométricos definidas por las ecuaciones (3.21).

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln T} = \sum_{j=1}^{JJ} (\alpha'_{ij} - \alpha''_{ij}) \left[(N_{fj} + \frac{E_{fj}}{RT} - \alpha_j - n'_j)(r_{fj} - r_{bj}) - r_{bj} \sum_{n=1}^{NS} (\alpha'_{nj} - \alpha''_{nj}) \frac{h_n}{RT} \right] \tag{5.71}$$

funcional de σ_m:

$$\frac{\partial f_m}{\partial \ln \sigma_k} = \sigma_k \qquad ; k = 1,...,NS \tag{5.72}$$

$$\frac{\partial f_m}{\partial \ln \sigma_m} = - \sigma_m \tag{5.73}$$

$$\frac{\partial f_m}{\partial \ln T} = 0 \tag{5.74}$$

funcional de energía:

$$\frac{\partial f_T}{\partial \ln \sigma_k} = \frac{\sigma_k h_k}{RT} \qquad ; k=1,...,NS \tag{5.75}$$

$$\frac{\partial f_T}{\partial \ln \sigma_m} = 0 \tag{5.76}$$

$$\frac{\partial f_T}{\partial \ln T} = \sum_{n=1}^{NS} \frac{\sigma_n Cp_n}{R} + \frac{1}{R}\frac{\partial Q}{\partial T} - f_T \tag{5.77}$$

En el anexo C se dan más detalles sobre el término $\frac{\partial Q}{\partial T}$.

5.5 Comentarios

A pesar de las ventajas que la resolución simultánea punto a punto presenta sobre la alternativa anterior en cuanto a convergencia de la solución, no está tampoco libre de problemas de ese tipo. Este procedimiento se desarrolló originalmente para obtener soluciones de equilibrio químico, en cuyo caso, mediante una selección adecuada de las variables de corrección, el número de ecuaciones a resolver es sólo NLM + 2 (con NLM el número de elementos químicos involucrados), y dichas variables de corrección son mucho menos sensibles a las variaciones en otros parámetros que los σ_i. Por lo tanto para el caso de estados cinéticos estacionarios es necesaria una selección más cuidadosa de las estimaciones iniciales, las que deben estar próximas a la solución final.

Por otro lado, al haber considerado química de rapidez finita sin influencia de la micromezcla, cada volumen de control de la malla es tratado como un reactor perfectamente mezclado, interconectado con sus vecinos. Esto otorga un control cinético-químico de la combustión, lo cual es adecuado para describir combustión de muy alta intensidad. En quemadores de carbón pulverizado rara vez existe un control químico de la combustión, siendo predominantemente de tipo difusional[2]: cuando el combustible (en este caso los volátiles) y el aire no están premezclados, y la rapidez de las reacciones químicas es mucho mayor que la de la micromezcla, aquéllas pueden considerarse de rapidez infinita (o equilibradas), y el control se torna difusional. Así, el emplear química de rapidez finita sólo entrega resultados precisos si pueden determinarse los índices de contacto para cada reacción. Como se dijo en 3.4, existen modelos probabilísticos para esto último, aunque todavía en desarrollo.

Una modelación de este tipo consiste esencialmente en representar la variación local de la fracción másica combustible/mezcla, f, (corregida adecuadamente para representar a los volátiles), por una función de densidad de probabilidad, P(f), definida de modo que P(f)df sea la fracción de tiempo, sobre un intervalo suficientemente largo, durante la cual f está en el rango [f, f + df]. El promedio de f y su varianza ($\overline{f}$ y g respectivamente) se obtienen resolviendo sendas ecuaciones de transporte[2] de la forma (5.1) (modelo $\overline{f}$-g). Los valores medios de σ_i y T se determinan entonces mediante

$$\bar{\sigma}_i = \int_{f_{min}}^{f_{max}} \hat{\sigma}_i(f)\, P(f)\, df \qquad (5.78)$$

$$\bar{T} = \int_{f_{min}}^{f_{max}} \hat{T}(f)\, P(f)\, df \qquad (5.79)$$

donde f_{min} y f_{max} son funciones de $\bar{f}$ y g, y $\hat{\sigma}_i(f)$, $\hat{T}(f)$ corresponden a la solución de equilibrio químico. También es posible estimar los términos de correlación que entran en la evaluación de los índices de contacto, por ejemplo

$$\overline{\sigma_i' \sigma_j'} = \int_{f_{min}}^{f_{max}} P(f)\, \hat{\sigma}_i(f)\, \hat{\sigma}_j(f)\, df - \bar{\sigma}_i\, \bar{\sigma}_j \qquad (5.80)$$

$$\overline{\sigma_i' T'} = \int_{f_{min}}^{f_{max}} P(f)\, \hat{\sigma}_i(f)\, \hat{T}(f)\, df - \bar{\sigma}_i\, \bar{T} \qquad (5.81)$$

Sin embargo este método resulta indicado principalmente para combustibles gaseosos, en cuyo caso es posible precalcular una solución única de equilibrio para todos los nodos. Para carbón pulverizado en cambio, por existir fuentes de especies y energía dentro del campo, las condiciones de equilibrio deben calcularse para cada nodo, lo cual aumenta considerablemente el tiempo de computación. Por esto y porque no se cuenta con información sobre la validez de esta formulación probabilística se opta por el enfoque tradicional de química de rapidez finita, como primera etapa hacia un modelo de control difusional de la combustión. Además aquel enfoque, con índices de contacto estimados a partir de expresiones del tipo (5.80), (5.81), se presta mejor para una futura inclusión de reacciones de especies polutantes, para las cuales el modelo $\bar{f}$-g ha mostrado ser inadecuado[2].

5.6 Condiciones de contorno

La malla de discretización esta dada por una red rectangular de $N_i \times N_j$ nodos (N_i columnas, N_j filas), aproximándose el ángulo del difusor del quemador mediante una expansión escalonada de la malla en la zona de inyección (vease fig. 8.1). Los nodos situados sobre los contornos acotan el campo solución, y el valor de las variables en dichos puntos permanece constante o es ajustado según los valores que se tienen hacia el interior. Las iteraciones comprenden, por lo tanto, los nodos con índices (i,j) tales que :
$2 \leq i \leq N_i\text{-}1$ y $2 \leq j \leq$ jmax(i), con jmax(i) el máximo índice j dentro del campo solución para cada columna i.

El campo solución tiene cinco clases diferentes de fronteras: entrada, salida, pared norte, pared oeste y eje de simetría; las que se muestran en la fig. 5.3. En ésta se indican los nodos dentro del campo solución que limitan con una frontera y sus nodos vecinos al otro lado de ella. La mayoría de las condiciones de contorno se imponen anulando la conexión con estos últimos nodos a través de los coeficientes de transporte.

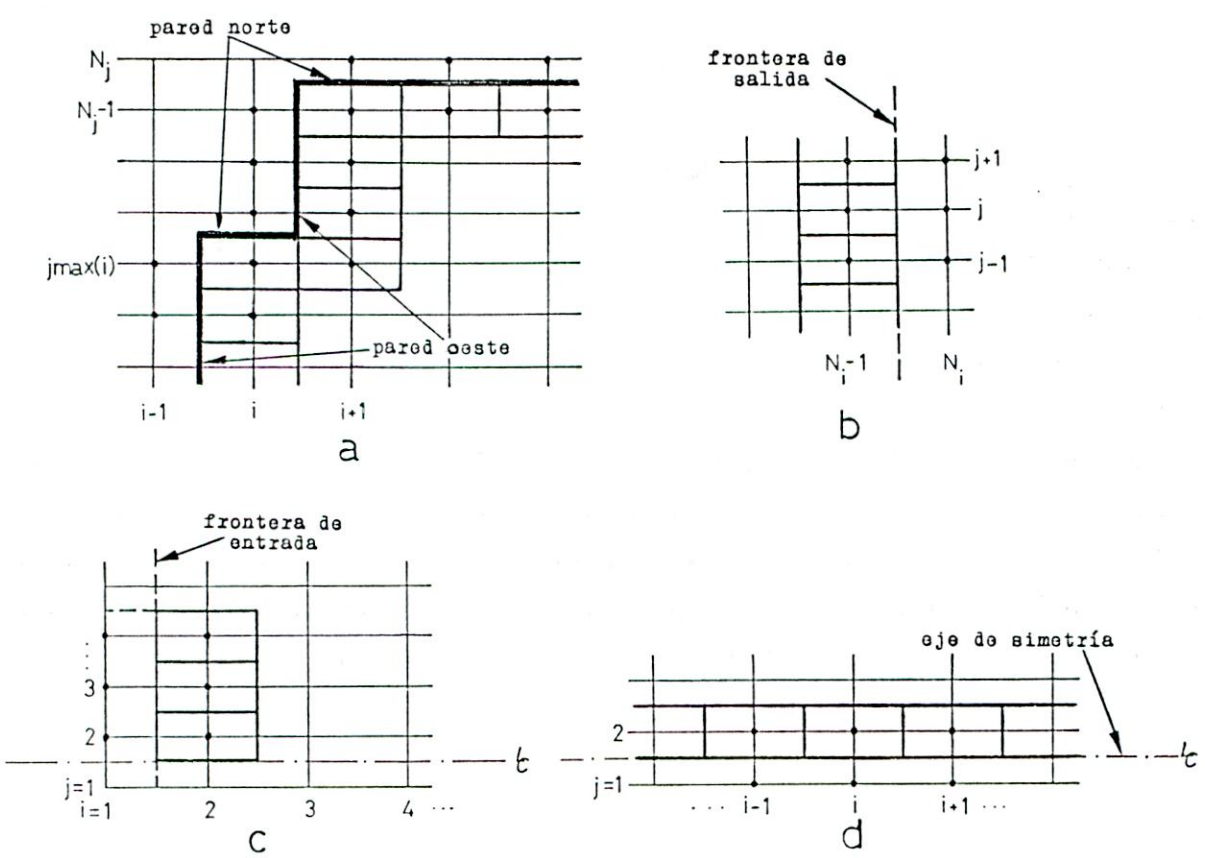


Fig. 5.3 Fronteras del campo solución

-Paredes norte y oeste

A través de estas paredes no puede haber transporte convectivo de ninguna cantidad, si bien para la ecuación de energía existe transporte difusivo por conducción de calor hacia el exterior. Esta condición se impone haciendo

$$a_N = 0 \quad \text{, en pared norte} \tag{5.82}$$

$$a_W = 0 \quad \text{, en pared oeste} \tag{5.83}$$

y considerando el transporte difusivo de energía como un término fuente adicional. El flujo de calor del gas hacia la pared por unidad de área, q_w, se obtiene mediante "funciones de pared":

$$q_w = \frac{(\tau_w \rho)^{1/2} Cp(T - T_w)}{T^+} \tag{5.84}$$

las que se deducen en el anexo D. T_w es la temperatura de pared y T^+ la temperatura adimensional del gas, cuya definición y cálculo se da en el anexo mencionado. Multiplicando q_w por el área del VC transversal al flujo de calor y dividiendo por su volumen se obtiene la pérdida de calor por unidad de volumen para las celdas fronterizas, la cual, por constituir un sumidero, se resta al término fuente total de energía:

$$S^h = S^h - q_w \frac{A_t}{\Delta V} \tag{5.85}$$

Para los nodos que limitan con ambas paredes se calcula el flujo de calor hacia cada una y se superponen en el término fuente. La temperatura de pared se determina para cada punto resolviendo una ecuación de balance térmico que incluye la convección y radiación desde el interior y la conducción hacia el exterior (anexo E).

-Entrada:

A la entrada, la composición del gas es la del aire (fracciones másicas[9]: x_{N_2}=0,76849; x_{O_2} = 0,23151). Por consiguiente, para los nodos con i=1 se especifica:

$$\sigma_{N_2} = \frac{x_{N_2}}{M_{N_2}} \tag{5.86}$$

$$\sigma_{O_2} = \frac{x_{O_2}}{M_{O_2}} \tag{5.87}$$

$$\sigma_k = 0 \quad \text{, para las demás especies} \tag{5.88}$$

La entalpía del gas se calcula según esta composición, empleándose valores prescritos de temperatura.

-Salida:

El flujo de salidad de cada especie debe coincidir con la suma de su flujo de entrada al campo y su creación o destrucción neta en él. Los valores de σ_k en la salida ($i=N_i$) se calculan entonces a partir de los σ_k en los nodos anteriores ($i=N_i-1$) sumándoles una corrección que permita garantizar la condición dada.

Para la ecuación de energía se aplica la condición $\frac{\partial h}{\partial x} = 0$ haciendo

$$a_E = 0 \tag{5.89}$$

-Eje de simetría:

La condición de simetría implica que a través del eje de simetría no puede existir flujo de ninguna clase, por lo que para las ecuaciones de especies y energía se hace

$$a_S = 0 \tag{5.90}$$

5.7 Disipación viscosa en las paredes

Para las celdas adyacentes a las paredes los esfuerzos y gradientes de velocidad que intervienen en el cálculo de la disipación viscosa se determinan mediante las funciones de pared empleadas en la modelación del campo de flujo (anexo D). Además, en dichas celdas la disipación viscosa puede expresarse en términos de la generación de energía cinética turbulenta como

$$\Phi S^h = G - \frac{u}{r}\tau_{xr} - 2\frac{w}{r}\tau_{r\theta} + 2\mu_{eff}\left[\frac{v}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r}\right) - \frac{1}{3}\left(\nabla \cdot \mathbf{v}_g\right)^2\right] \tag{5.91}$$

con lo cual se reducen los cálculos a efectuar, pues G se ha determinado previamente en la solución del campo de flujo. La ecuación (5.91) se deduce en el anexo F.

6. RADIACION

Debido a la naturaleza altamente emisiva y absorvente de los componentes de una llama de carbón pulverizado, la radiación es el modo dominante de transferencia de calor en la cámara de combustión. Se estima[2] que aproximadamente un 95% de la transferencia de calor se debe a la radiación térmica.

6.1 Ecuación de transferencia radiativa

Un haz de radiación atravesando un medio es atenuado por su interacción con la materia, lo cual se manifiesta en la dispersión y absorción de radiación. El flujo de radiación dispersado es el que emerge del medio en una dirección diferente a la de incidencia (la dispersión redistribuye el flujo de radiación atenuado en otras direcciones). El flujo absorbido es el que no reemerge del medio en el que incide, sino que es transformado en energía interna.

El efecto de atenuación se cuantifica según la ley de Bougert-Lambert (suponiendo independencia espectral):

$$I = I_o \exp(- K_t l) \tag{6.1}$$

donde I_o es la intensidad de la radiación incidente, l es la distancia recorrida a través del medio y K_t el coeficiente de atenuación, el cual se expresa como la suma de un coeficiente de absorción y uno de dispersión:

$$K_t = K_a + K_s \tag{6.2}$$

La transferencia radiativa está gobernada por la ecuación integro-diferencial (6.3). Según ésta, la variación de la intensidad de radiación confinada en un ángulo sólido Ω en una dirección S dada es[2,10]:

$$\hat{S} \cdot \nabla I = -(K_a + K_s)I + K_a I_b(T_e) + \frac{K_s}{4\pi} \int_{\Omega'=4\pi} P(S',S)\, I(S')\, d\Omega' \tag{6.3}$$

El primer término del lado derecho corresponde a la atenuación por absorción y dispersión de la radiación incidente, el segundo es la ganancia por emisión a temperatura T_e, y el tercero es la ganancia por dispersión en la dirección S de radiación proveniente de una dirección S'. P(S',S) es la función de fase, y es de importancia considerable si la dispersión es anisotrópica. $(1/4\pi)P(S',S)d\Omega'$ representa la probabilidad de que un haz incidente (S', $d\Omega'$) sea dispersado en la dirección (S, $d\Omega$), por lo que es una función normalizada de modo que

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega'=4\pi} P(S',S)\, d\Omega' = 1 \qquad (6.4)$$

Por lo tanto, P(S',S) se puede interpretar como el cuociente entre la intensidad dispersada en una dirección dada y la intensidad que sería dispersada en esa dirección si la dispersión fuera isotrópica.

6.2 Dispersión

De lo anterior se sigue que si la dispersión es isotrópica, P(S',S) = 1. Cuando las partículas que interceptan la radiación son más grandes que su longitud de onda, la dispersión es anisotrópica[2] y debe determinarse la función de fase.

A bajas concentraciones de partículas, la intensidad dispersada puede calcularse multiplicando el número total de partículas por la intensidad dispersada por una sola partícula (dispersión simple), pero al aumentar la concentración, la radiación que ha sido dispersada dos o más veces cobra importancia (dispersión múltiple). Un criterio aproximado al respecto[10] es considerar dispersión simple si $s/\lambda > 0,3$ y $s/d_p > 0,4$, con s la separación entre las partículas. Otras estimaciones consideran como condición suficiente[13] $s/d_p > 1,5$. No obstante, estos criterios no parecen ser muy precisos ni de aplicación general. Según la ref.[2] la clase dominante de dispersión en llamas de carbón pulverizado es múltiple y anisotrópica.

6.2.1 Tipo de dispersión

La dispersión es producida por la reflexión, refracción y difracción de la radiación en su interacción con las partículas. Tales fenómenos dependen de las propiedades ópticas de éstas, de su geometría y de su tamaño relativo a la longitud de onda de la radiación. Para esto último se define el parámetro de tamaño

$$a = \frac{\pi d_p}{\lambda} \qquad (6.5)$$

Si $a > 5$ la dispersión es principalmente un proceso de reflexión y puede calcularse mediante relaciones geométricas relativamente simples[10]. Para $a < 0,6/n$ (con n el índice de refracción simple) puede emplearse la dispersión de Rayleigh. En el rango intermedio son aplicables los resultados de la dispersión de Mie, los cuales son soluciones generales bastante complicadas de las ecuaciones de Maxwell.

En combustión de carbón pulverizado las partículas de coque claramente quedan en el rango $a > 5$, por lo que la dispersión que provocan es principalmente un proceso de reflexión difusa. En el caso del hollín, las partículas pueden ser suficientemente pequeñas para dar lugar a interacción con la radiación como cuerpos semitransparentes. Análisis de la dispersión por hollín con $a=1,2$ concuerdan con los resultados de Mie, siendo notablemente diferentes del patrón de dispersión por partículas grandes[14]. En cuanto a las cenizas volantes, hay una doble situación derivada de la doble distribución de tamaños. Las cenizas de mayor tamaño tienen un comportamiento similar a las del carbón[11]. En las del rango menor y submicroscópico rige la dispersión de Mie. Además, cenizas volantes con radios del orden de λ tiene propiedades de dispersión significativamente diferentes de las de partículas de carbón del mismo tamaño.

La dispersión ocasionada por las cenizas es mayor que la provocada por las partículas de coque, las que son fuertemente absorbentes. A pesar del predominio numérico de las cenizas submicroscópicas es de esperarse que las partículas grandes (cenizas mayores y coque) dominen la dispersión, pues la radiación dispersada se incrementa aproximadamente según el cuadrado del diámetro de la

partícula[11]. Por lo tanto se emplea la dispersión por reflexión difusa sobre las partículas (ya que además, no se modela la formación de hollín y cenizas). Por otro lado, como se verá en 6.5.2, el tipo de dispersión considerado es fácilmente modificable en el modelo de solución adoptado.

6.2.2 Función de fase

Para obtener la función de fase debe tomarse en cuenta también la forma de las partículas. Algunos autores[2] sugieren que las partículas de carbón después de la desvolatilización adquieren una forma aproximadamente esférica, pero estudios más recientes[2 3] muestran que las partículas tienden a tomar una forma alargada. La dispersión por partículas no esféricas es mucho más compleja, por lo que para simplificar se considera dispersión por partículas esféricas. Esta simplificación no es tan arbitraria como puede parecer. Si se considera un sistema de partículas de formas irregulares cuyas superficies se suponen compuestas por porciones convexas, debido a que las partículas están en una orientación aleatoria, una porción igual de elementos de superficie se orientarán en cada dirección angular, lo cual coincide con la distribución angular de elementos de superficie para partículas esféricas[10]. El resultado neto es que la distribución angular de la radiación dispersada por las partículas dentro de un volumen de control, vista desde afuera de éste, será la misma que la dispersada por las partículas esféricas.

Otra simplificación necesaria es considerar sólo dispersión simple debido a la gran complejidad matemática de la dispersión múltiple. Con todo esto, la función de la fase utilizada es

$$P(\theta) = \frac{8}{3\pi} (\text{sen}\theta - \theta\cos\theta) \quad , 0 \leq \theta \leq \pi \tag{6.6a}$$

$$P(\theta) = P(2\pi - \theta) \quad , \pi \leq \theta \leq 2\pi \tag{6.6b}$$

con θ el ángulo respecto a la dirección de la radiación incidente. La ecuación (6.6b) establece la simetría de la función respecto a la dirección de incidencia. Esta función se deduce en el anexo G y es la función de fase recomendada para combustión de carbón pulverizado[2]. La fig. 6.1 muestra un diagrama polar de $P(\theta)$. Se aprecia que la

dispersión es máxima en $\theta=180°$, es decir, en la dirección opuesta a la de incidencia.

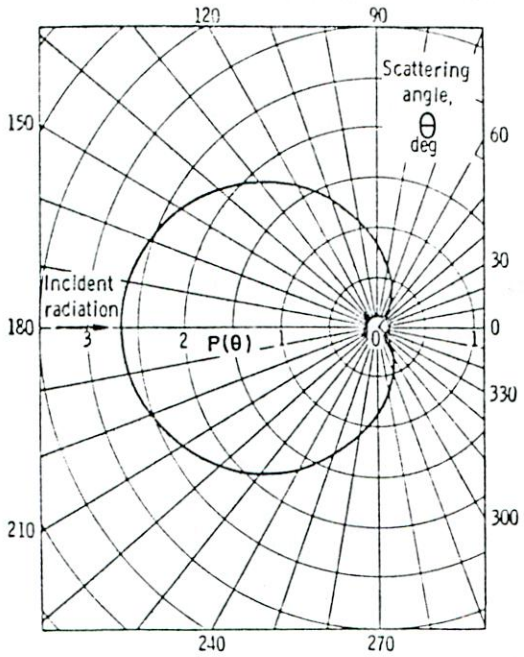


Fig. 6.1 Función de fase para dispersión por reflexión difusa sobre partículas esféricas[10].

6.2.3 Coeficiente de dispersión

El coeficiente de dispersión K_s se determina a partir del área total de dispersión X_s, la cual se define como el área transversal de un haz de radiación incidente tal que el flujo de energía a través de ella sea igual a la energía total dispersada por la partícula en todas las direcciones.

Para un VC, K_s se obtiene multiplicando X_s para cada clase de partícula por el número de partículas de dicha clase contenidas por unidad de volumen (nótese que aquí se emplea la simplificación de dispersión simple). De este modo, K_s debe calcularse como

$$K_s = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \sum_k \sum_l N_{kli} \, X_{sli} \qquad ; \text{i=coque, ceniza, hollín} \qquad (6.7)$$

Normalmente la contribución del hollín a la dispersión puede despreciarse[2,12].

X_s se calcula en términos de un factor de eficiencia, Q_s, respecto al área transversal geométrica:

$$X_s = Q_s \frac{\pi d_p^2}{4} \tag{6.8}$$

Q_s presenta muy poca dependencia del parámetro de tamaño, por lo que para coque se toma un valor constante de

$$Q_s = 0{,}4 \tag{6.9}$$

(suponiendo un índice de refracción 1,93-1,02i y $\lambda=2[\mu m]$, valores representativos para combustión de carbón pulverizado[2]). Ya que la modelación de las partículas no incluye la formación de cenizas ni hollín, la evaluación de K_s en (5.7) se efectúa solamente para el coque:

$$K_s = \frac{\pi}{4\ \Delta V} 0{,}4 \sum_k \sum_l N_{kl}\, d_p^2(l) \tag{6.10}$$

6.3 Absorción

La absorción no se debe sólo a las partículas, sino también al gas, de manera que

$$K_a = K_{ap} + K_{ag} \tag{6.11}$$

con K_{ap} y K_{ag} los coeficientes de absorción debido a las partículas y al gas respectivamente. K_{ap} se determina en forma analoga a K_s, mediante un factor de eficiencia de absorción, Q_a. Para el coque, con las propiedades mencionadas, se tiene

$$Q_a \approx 0{,}8 \tag{6.12}$$

El hollín es altamente absorbente y su influencia en K_{ap} es considerable. Sin embargo, por ahora la única posibilidad de incluirlo sería mediante información experimental. Por lo tanto, se tiene solamente

$$K_{ap} = \frac{\pi}{4\ \Delta V} 0{,}8 \sum_k \sum_l N_{kl}\, d_p^2(l) \tag{6.13}$$

La absorción del gas se debe fundamentalmente a la presencia de CO_2 y H_2O, y su coeficiente de absorción se puede obtener a partir de su emisividad como

$$K_{ag} = -\frac{1}{L}\ln(1-\varepsilon_g) \tag{6.14}$$

donde L es la longitud media del haz, que puede calcularse en forma aproximada como

$$L = 3{,}6\,\frac{\Delta V}{A} \tag{6.15}$$

con ΔV y A el volumen y el área total del VC, respectivamente. Para la emisividad del gas se tiene

$$\varepsilon = C_{CO_2}\,\varepsilon_{CO_2} + C_{H_2O}\,\varepsilon_{H_2O} - \Delta\varepsilon \tag{6.16}$$

con C_{CO_2} y C_{H_2O} factores de corrección para una mezcla gaseosa a una presión total distinta de 1 [atm]. En este caso, ya que la presión en toda la cámara de combustión es prácticamente la atmosférica, se toma $C_{CO_2} = C_{H_2O} = 1$. Por su parte, $\Delta\varepsilon$ es una corrección por superposición de bandas de absorción, y depende de L y de las presiones parciales de CO_2 y H_2O en la mezcla. Para la malla de discretización utilizada los valores de L son suficientemente pequeños (L_{max} = 17,74[mm]) para considerar $\Delta\varepsilon$=0, incluso para altas concentraciones de CO_2 y H_2O. Para estimar ε_{CO_2} y ε_{H_2O} se emplean las curvas de Hottel de estas propiedades, las cuales se hallan parametrizadas respecto a los productos $p_{CO_2}L$ y $p_{H_2O}L$. Dichas curvas se regresionaron en el programa sobre un rango suficiente de pL y temperatura, de modo que ε_g se determina en cada celda, empleando sus valores locales de L y presiones parciales. Estas se calculan como

$$p_k = \sigma_k M_g p_g \qquad , k= CO_2 , H_2O \tag{6.17}$$

6.4 Temperatura de equilibrio

Estrictamente, las propiedades radiativas de un volumen de control no pueden definirse a menos que existan condiciones de

equilibrio termodinámico local. Aunque la temperatura del gas puede considerarse uniforme en el VC, la presencia de partículas a diferentes temperaturas confiere una distribución de temperatura heterogénea a la nube gas-partículas. Por esto se define una temperatura de equilibrio para la celda como un promedio de las temperaturas de los diversos componentes:

$$T_e^4 = \frac{\sum_i K_{ai}\, T_i^4}{\sum_i K_{ai}} \qquad ; \text{i=coque, (cenizas, hollín), } CO_2 \text{ , } H_2O \qquad (6.18)$$

6.5 Solución de la ecuación de transferencia radiativa

Los procedimientos más precisos disponibles actualmente para la modelación de campos de radiación en hornos son el método de zonas y el método Monte-Carlo, los cuales han tenido una amplia y exitosa aplicación en situaciones en las que los campos de flujo y concentraciones son conocidos. Sin embargo, estos métodos no han sido empleados extensamente como parte de una modelación completa debido a que la ecuación de transferencia radiativa, por su forma integro-diferencial, no se adapta bien a una solución acoplada con las ecuaciones de transporte fluidodinámicas y termoquímicas. Por esta razón, el método de flujos surge como alternativa, aunque menos precisa, para modelaciones completas.

6.5.1 Método de flujos

En este método la distribución angular continua de intensidades sobre un volumen de control es reemplazada por un número finito de flujos de radiación en diferentes direcciones (fig. 6.2) que corresponden a la intensidad integrada sobre el ángulo sólido asociado a cada una de esas direcciones. Esto reduce la complejidad de la ecuación (6.3) debido a la dependencia angular de la intensidad, al transformar el término integral en una suma discreta. Existen numerosas versiones de éste método, empleándose en este trabajo un método de 4 flujos basado en el de 6 flujos de Chu y Churchill,

reducido a 4 por la condición de simetría axial. La deducción de las ecuaciones de este modelo se presenta en el anexo I, en lo que sigue se describen sólo los aspectos principales.

En el modelo de 4 flujos, el vector $\mathbf{q}_R$ que describe el flujo neto de radiación, puede expresarse como

$$\mathbf{q}_R = (Qx\ ,\ Qr) = (F_x^+ - F_x^-\ ,\ F_r^+ - F_r^-) \tag{6.19}$$

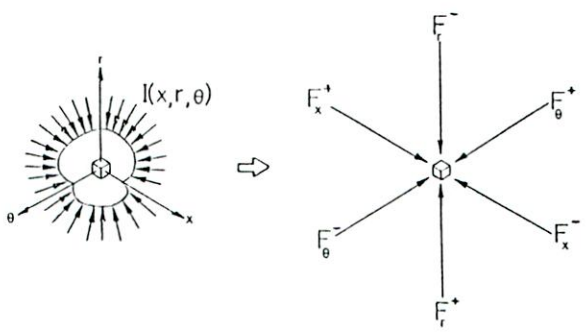


Fig 6.2 Intensidad de radiación sobre un VC discretizada en 6 componentes ortogonales.

Planteando un balance de energía para cada flujo al atravesar un VC se obtiene el sistema

$$\frac{dF_x^+}{dx} = - C_1F_x^+ + C_2F_x^- + C_3(F_r^+ + F_r^-) + C_4 \tag{6.20a}$$

$$\frac{dF_x^-}{dx} = C_1F_x^- - C_2F_x^+ - C_3(F_r^+ + F_r^-) - C_4 \tag{6.20b}$$

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rF_r^+) = - C_1F_r^+ + C_2F_r^- + C_3(F_x^+ + F_x^-) + C_4 \tag{6.20c}$$

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rF_r^-) = C_1F_r^- - C_2F_r^+ - C_3(F_x^+ + F_x^-) - C_4 \tag{6.20d}$$

donde C_1 , C_2 , C_3 y C_4 son constantes propias de cada VC y dependen de los valores locales de K_a , K_s , T_e , etc. (anexo I).

Definiendo dos nuevas variables, Fx y Fr, como

$$Fx = \frac{1}{2}(F_x^+ + F_x^-) \tag{6.21}$$

$$Fr = \frac{1}{2}(F_r^+ + F_r^-) \tag{6.22}$$

el sistema (6.20) de 4 ecuaciones de primer orden se reduce a dos ecuaciones de segundo orden para estas variables:

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma \frac{dFx}{dx}\right) - (C_2 - C_1)Fx - (2C_3Fr + C_4) = 0 \tag{6.23}$$

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\Gamma \frac{d}{dr}(r\,Fr)\right) - (C_2 - C_1)Fr - (2C_3Fx + C_4) = 0 \tag{6.24}$$

con $$\Gamma = -1/(C_1 + C_2) \tag{6.25}$$

Estas son las ecuaciones que finalmente se resuelven, obteniéndose los campos de Fx y Fr que permiten calcular las fuentes radiativas para el gas y las partículas. No obstante, Fx y Fr no tienen un significado físico muy útil (pueden interpretarse como un flujo radiativo medio en su respectiva dirección). Para apreciar las características del campo de radiación son más convenientes las variables Qx y Qr, las que pueden calcularse a partir de Fx y Fr como

$$Qx = 2\Gamma \frac{dFx}{dx} \tag{6.26}$$

$$Qr = 2\Gamma \frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r\,Fr) \tag{6.27}$$

6.5.2 Modelación de dispersión anisotrópica

La anisotropía de la dispersión puede modelarse en forma simple en el método de 4 flujos mediante la definición de componentes de dispersión hacia adelante (f), hacia atrás (b) y hacia los lados (s), las cuales se incluyen en el cálculo de C_1, C_2, C_3, C_4. Estas componentes corresponden a las fracciones de la radiación total dispersada que son dirigidas en la dirección de incidencia, en la dirección opuesta a la de incidencia y en las direcciones perpendiculares a la de incidencia, respectivamente (fig. 6.3). La obtención de f, b y s en términos de la función de fase se encuentra en el anexo H, siendo el resultado

$$f = 2\pi \int_0^{\pi/2} \frac{P(\theta)}{4\pi} \cos^2\theta \ \text{sen}\theta \ d\theta \qquad (6.28)$$

$$b = 2\pi \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{P(\theta)}{4\pi} \cos^2\theta \ \text{sen}\theta \ d\theta \qquad (6.29)$$

$$s = \frac{1}{4}(1 - f - b) \qquad (6.30)$$

Reemplazando la función de fase (6.6) en estas ecuaciones se obtiene

$$f = \frac{1}{48} \qquad (6.31)$$

$$b = \frac{17}{48} \qquad (6.32)$$

$$s = \frac{15}{96} \qquad (6.33)$$

Estos resutados son consecuentes con el gráfico de la fig. 6.1: la dispersión es máxima hacia atrás, seguida de cada una de las direcciones laterales, mientras que hacia adelante la dispersión es bastante menor, como se muestra a escala en la fig. 6.3

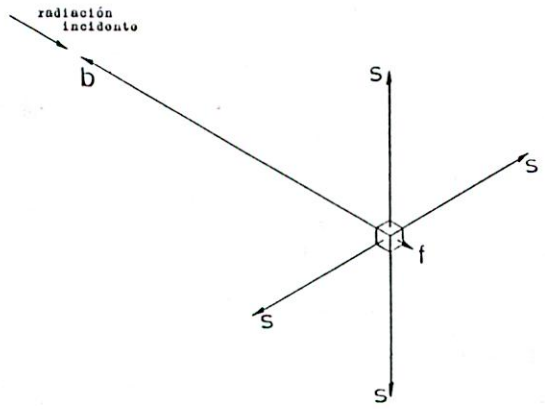


Fig. 6.3 Distribución discretizada de radiación dispersada para la función de fase (6.6).

Como se mencionó anteriormente, con esta modelación el tipo de dispersión considerado puede cambiarse fácilmente sin alterar mayormente el programa computacional. Basta modificar el valor de las constantes f, b y s, calculadas según otra función de fase, para simular, aunque en forma simplificada, otros modos de dispersión.

6.5.3 Ecuaciones discretizadas

Las ecuaciones (6.23) y (6.24) pueden discretizarse en forma análoga a una ecuación de transporte como

$$(a_E + a_W - Sp^{Fx})Fx_P = a_E\, Fx_E + a_W\, Fx_W + Su^{Fx} \qquad (6.34)$$

$$(a_N + a_S - Sp^{Fr})Fr_P = a_N\, Fr_N + a_S\, Fr_S + Su^{Fr} \qquad (6.35)$$

Los coeficientes se evalúan mediante las expresiones dadas en el anexo J. estas ecuaciones se resuelven también por el método línea a línea y TDMA. Para (6.34), por no existir dependencia de los vecinos N y S se resuelve por filas W-E, avanzando en dirección radial.

6.5.4 Condiciones de contorno.

a) Paredes norte y oeste:

Análogamente a lo visto en 5.6, para las paredes norte y oeste se rompe la conexión con el último nodo anulando el coeficiente correspondiente en (6.34) y (6.35) e incluyendo el flujo neto de energía radiante que es absorbida y conducida al exterior a través de estas fronteras, como un término fuente adicional. Para esto es necesario conocer, en los VC adyacentes a las paredes, el valor de Qx y Qr en las fronteras w y n respectivamente. Las relaciones (6.26) y (6.27) permiten determinar estas variables sólo en los nodos interiores de la malla, por lo que en los contornos Qx y Qr deben calcularse a partir de sus ecuaciones de definición como

$$Qx_w = (F_x^+ - F_x^-)_w \qquad (6.36)$$

$$Qr_n = (F_r^+ - F_r^-)_w \qquad (6.37)$$

donde F_{rw}^+ y F_{rn}^- corresponden a los flujos radiativos incidentes sobre las paredes (figs. 6.4 y 6.5). Debido a que estos flujos no se conocen explícitamente es necesario usar una aproximación para los mismos.

- Pared norte:

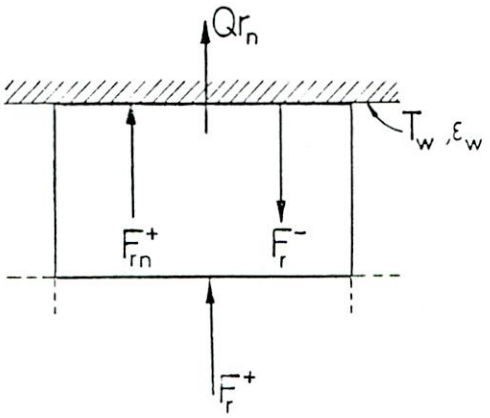


Fig. 6.4 Flujos radiativos para un VC adyacente a la pared norte.

La condición de contorno es

$$F_r^- = \varepsilon_w \sigma T_w^4 + (1 - \varepsilon_w) F_{rn}^+ \qquad (6.38)$$

es decir, el flujo radiativo que ingresa al VC en dirección -r esta dado por la emisión de la pared y la fracción reflejada de la radiación incidente sobre ella. En relación a F_{rn}^+ , una aproximación aceptable es $F_{rn}^+ \approx F_r^+$, donde se ha despreciado la atenuación y emisión de radiación en la celda, ya que es poco probable que por las celdas vecinas a las paredes pase alguna trayectoria de partículas, cuya influencia predomina ampliamente sobre el gas, que tiene una emisividad cercana a cero. Con esta aproximación y las ecuaciones (6.22) y (6.38) se obtiene

$$F_r^+ = \frac{2Fr_P - \varepsilon_w \sigma T_w^4}{2 - \varepsilon_w} \qquad (6.39)$$

y reemplazando (6.38) y (6.39) en (6.37) se obtiene

$$Qr_n = \frac{2\varepsilon_w}{2 - \varepsilon_w} (Fr_P - \sigma T_w^4) \qquad (6.40)$$

el cual se resta al término fuente de Fr. La condición de contorno se especifica, por lo tanto, como

$$a_N = 0 \tag{6.41}$$

$$Sp^{Fr} = Sp^{Fr} - \frac{2\varepsilon_w}{2 - \varepsilon_w} \tag{6.42}$$

$$Su^{Fr} = Su^{Fr} + \frac{2\varepsilon_w \sigma T_w^4}{2 - \varepsilon_w} \tag{6.43}$$

En el anexo K se presenta un desarrollo alternativo más exacto, que sí considera la atenuación y emisión de radiación en la celda. No obstante, para las celdas que no contienen partículas, como ocurre en la mayoría de ellas, ambos enfoques resultaron prácticamente coincidentes (diferencias inferiores al 0,1%). Incluso para las celdas donde hay partículas la diferencia no resultó mayor del 6%. Por lo tanto, se ha optado por esta formulación de más fácil evaluación. Si en futuras aplicaciones del modelo se incluye la presencia de hollín, la absorción podría ser considerable en todas las celdas. En dicho caso se recomienda emplear las expresiones dadas en el anexo K.

- Pared oeste:

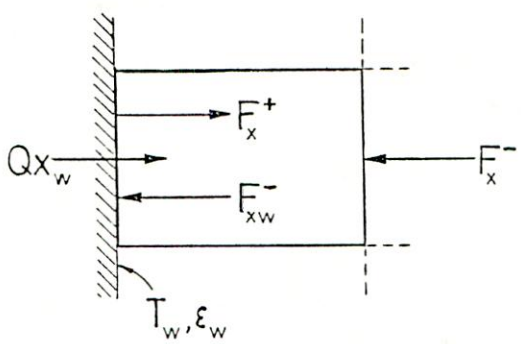


Fig. 6.5 Flujos radiativos para un VC adyacente a la pared oeste.

Análogamente, la condición para esta pared es

$$F_x^+ = \varepsilon_w \sigma T_w^4 + (1 - \varepsilon_w) F_{xw}^- \tag{6.44}$$

Haciendo $F^{-}_{xw} = F^{-}_{x}$ se obtiene

$$F^{-}_{x} = \frac{2Fx_P - \varepsilon_w \sigma T_w^4}{2 - \varepsilon_w} \tag{6.45}$$

y por lo tanto

$$Qx_w = \frac{2\,\varepsilon_w}{2 - \varepsilon_w}(\sigma T_w^4 - Fx_P) \tag{6.46}$$

En este caso Qx_w es el flujo neto de radiación desde la pared, por lo que debe sumarse al término fuente. De este modo,

$$a_W = 0 \tag{6.47}$$

$$Sp^{Fx} = Sp^{Fx} - \frac{2\varepsilon_w}{2 - \varepsilon_w} \tag{6.48}$$

$$Su^{Fx} = Su^{Fx} + \frac{2\varepsilon_w \sigma T_w^4}{2 - \varepsilon_w} \tag{6.49}$$

b) Entrada:

Se establece, como condición de contorno, que a través de la frontera de entrada no exista un flujo neto de radiación. Luego $Qx_w = 0$, condición que se fija haciendo

$$a_W = 0 \tag{6.50}$$

c) Salida:

Se aplica la condición $\frac{dFx}{dx} = 0$ mediante

$$a_E = 0 \tag{6.51}$$

d) Eje de simetría:

La condición de simetría implica que $\frac{dFr}{dr} = 0$, por lo cual

$$a_S = 0 \tag{6.52}$$

6.6 Fuentes radiativas

El objetivo principal de resolver el campo radiativo es cuantificar la influencia de éste sobre el gas y las partículas a través de las fuentes respectivas.

Como se anticipó en 3.9, la intensidad media sobre una partícula puede considerarse como[2] Fx + Fr. A pesar de que en realidad los flujos F_x^+, F_x^-, F_r^+, F_r^-, llegan atenuados (o reforzados) a las partículas interiores de un VC, dicho efecto se ha considerado de manera global el calcular Fx y Fr. Por esto, aunque la intensidad sobre partículas distintas puede ser diferente, al promediar sobre todas las partículas, el calor transferido a ellas por radiación se puede calcular tomando Fx + Fr como una intensidad media sobre todas las partículas de la celda. La transferencia radiativa neta a las partículas se calcula según la ecuación (3.68).

En cuanto a la fuente radiativa del gas, ya se dijo que $-\nabla \cdot \mathbf{q}_R$ es la radiación absorbida por unidad de volumen en una celda. Esta absorción se debe tanto al gas como a las partículas, por lo que descontando el efecto de éstas a $-\nabla \cdot \mathbf{q}_R$ se obtiene la fuente neta de radiación para el gas. De las ecuaciones (I.23) e (I.27) (anexo I) se llega a

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_R = -2[(C_2 - C_1 + 2C_3)(Fx + Fr) + 2C_4] \qquad (6.53)$$

Anulando la influencia de las partículas en esta expresión se obtiene

$${}_RS^h = 2K_{ag}\left[Fx + Fr - \frac{1}{3}\sigma T^4\right] \qquad (6.54)$$

Nota : ya que en el programa actual, con la simplificación $T_p = T_g$ no queda considerada la transferencia de calor entre las partículas el gas, ${}_RS^h$ se calcula según (6.53) para considerar en forma indirecta el calor absorbido por las partículas y transferido luego al gas por convección.

7. PROGRAMA COMPUTACIONAL

El programa computacional desarrollado corresponde a una versión ampliada del anterior código COMBUS, al cual se han agregado las subrutinas necesarias para la solución de las ecuaciones termoquímicas y el campo radiativo. Ya que la organización y estructura de COMBUS se describe en la ref.[9] sólo se mencionan aquí los aspectos principales concernientes a las modificaciones realizadas.

El nuevo código, denominado COMBUS2 se ha implementado en un computador IBM 9375, y su programa fuente ocupa aproximadamente 721[kBytes] de memoria en disco (el programa ejecutable requiere 1.068[KBytes]). Para la ejecución de este programa, incluyendo los archivos de datos, resultados y control, son necesarios, en su estado actual, al menos 4,6 [MBytes] de memoria en disco, y un acceso de 2[MBytes], como mínimo, a la memoria principal en el computador mencionado. El requerimiento de memoria en disco se puede disminuir suprimiendo el almacenamiento de resultados parciales en archivos de control.

7.1 Subrutinas

COMBUS2 consta, además del programa principal, de 62 subrutinas (40 de las cuales están tomadas de COMBUS) y 2 BLOCK DATA. Se describe a continuación la función de las 22 subrutinas adicionales:

CALCFX : resuelve campo de la variable Fx.

CALCFR : resuelve campo de la variable Fr.

CALCTW : calcula la temperatura adimensional T^+ para nodos adyacentes a las paredes y plantea la ecuación para la temperatura de pared en cada uno de ellos.

DFUNCS : calcula las derivadas parciales que componen la matriz jacobiana de los funcionales.

EMIGAS : calcula la emisividad del gas a partir de T , p_{CO_2} , P_{H_2O} y L, según regresiones de curvas de Hottel.

FLUINC : calcula los flujos másico y molar desde las partículas al gas.

FU : evalúa los funcionales (mediante DFUNCS) para cada una de las estimaciones generadas en NONLIN.

FUA : evalúa las derivadas parciales de los funcionales (mediante DFUNCS) para cada una de las estimaciones generadas en NONLIN.

FUNCS : calcula los funcionales de σ_i , σ_m y T.

GAUJ : resuelve el sistema lineal de ecuaciones de corrección de Newton-Raphson mediante eliminación gaussiana con pivote.

GORDON : calcula el coeficiente de relajación de Gordon-McBride.

NEWTON : resuelve el sistema de ecuaciones no lineales por el método de Newton-Raphson.

NONLIN : resuelve el sistema no lineal por el método de gradiente de Glasmacher-Sommer y se encarga de combinar la resolución con el método de Newton-Raphson.

QREACC : calcula el calor de reacción para la combustión homogénea.

QXQR : determina los campos de Qx y Qr a partir de las soluciones para Fx y Fr.

RADIAC : subrutina principal para la solución del campo radiativo. Calcula constantes del método de 4 flujos, controla la secuencia de iteración de CALCFX y CALCFR y calcula la fuente radiativa.

RADIA0 : inicializa campos de Fx y Fr y otras variables asociadas al campo radiativo.

SDVIEC : determina fuentes de disipación viscosa y energía cinética para la ecuación de energía.

TERMO : subrutina principal para la solución de las ecuaciones termoquímicas. Plantea el sistema no lineal para cada punto de la malla e impone condiciones de contorno.

TPARED : resuelve la ecuación para la temperatura de pared por el método regula-falsi.

UMSP : subrutina de manipulación de matrices de NONLIN.

VEK : calcula ∇Q y $\| \nabla Q \|$ (método del gradiente).

Como se dijo, las demás subrutinas están tomadas de COMBUS y solamente se han hecho modificaciones menores a algunas de ellas (FLOW, GASES, PROMO1, ESCRIG, LEGTUG).

7.2 Flujograma principal

Dado lo extenso del programa no es posible entregar aquí un flujograma completo, por lo que en la fig. 7.1 se presenta un flujograma muy simplificado del programa principal. En él se ha indicado básicamente la secuencia de llamada a las diferentes subrutinas, lo cual permite apreciar la estrategia de solución. La interrelación entre estas subrutinas y otras de menor jerarquía se indica, si es que existe, únicamente para las subrutinas listadas anteriormente; la estructuración de las subrutinas pertenecientes a COMBUS puede verse en la ref.[9].

La primera parte corresponde al ingreso de datos e inicialización de variables. Los BLOCK DATA inicializan valores constantes (coeficientes estequiométricos, regresiones, etc). Los datos para la modelación se ingresan mediante OPENA, INTERG e INTERJ ya sea a través del terminal o archivo (existe la opción de leer resultados almacenados de ejecuciones anteriores). GRID se encarga de calcular las variables que determinan la malla de discretización. Sigue la inicialización de los campos de flujo, especies, energía y radiación (FLOW0, EJE, GASES0, ENERG0, RADIA0). Se asigna al gas, en todo el campo, la composición del aire; para el campo de temperatura se asigna la misma estimación empleada en COMBUS, la cual pretende simular una distribución típica de temperatura en una llama de carbón pulverizado según datos experimentales. Las estimaciones iniciales para Fx y Fr se establecen en cada nodo, igualando los cuatro flujos radiativos incidentes al poder de emisión de las celdas vecinas en la dirección correspondiente. Todo estos campos iniciales y los datos previos son almacenados en el archivo de resultados (REDATA, PRINT).

Se obtiene a continuación una solución preliminar del campo de flujo (FLOW) (si es que no se emplea una solución anterior), y se inicia el loop principal que controla el acoplamiento de las partículas y el gas. Este loop se ejecuta dos veces, primero con baja precisión (hasta 15% de error en cada ecuación de conservación) y luego con alta precisión (1,5% de error). En la primera ejecución por cada cálculo de trayectorias y fuentes asociadas a las partículas (PSIC0, PSIC), se efectúa un loop interior que acopla FLOW y GASES. Esta última es la subrutina de COMBUS que resuelve las ecuaciones de especies en forma linealizada, manteniendo constante el campo de temperatura. Con esto se busca generar una distribución razonable de σ_i dentro del campo

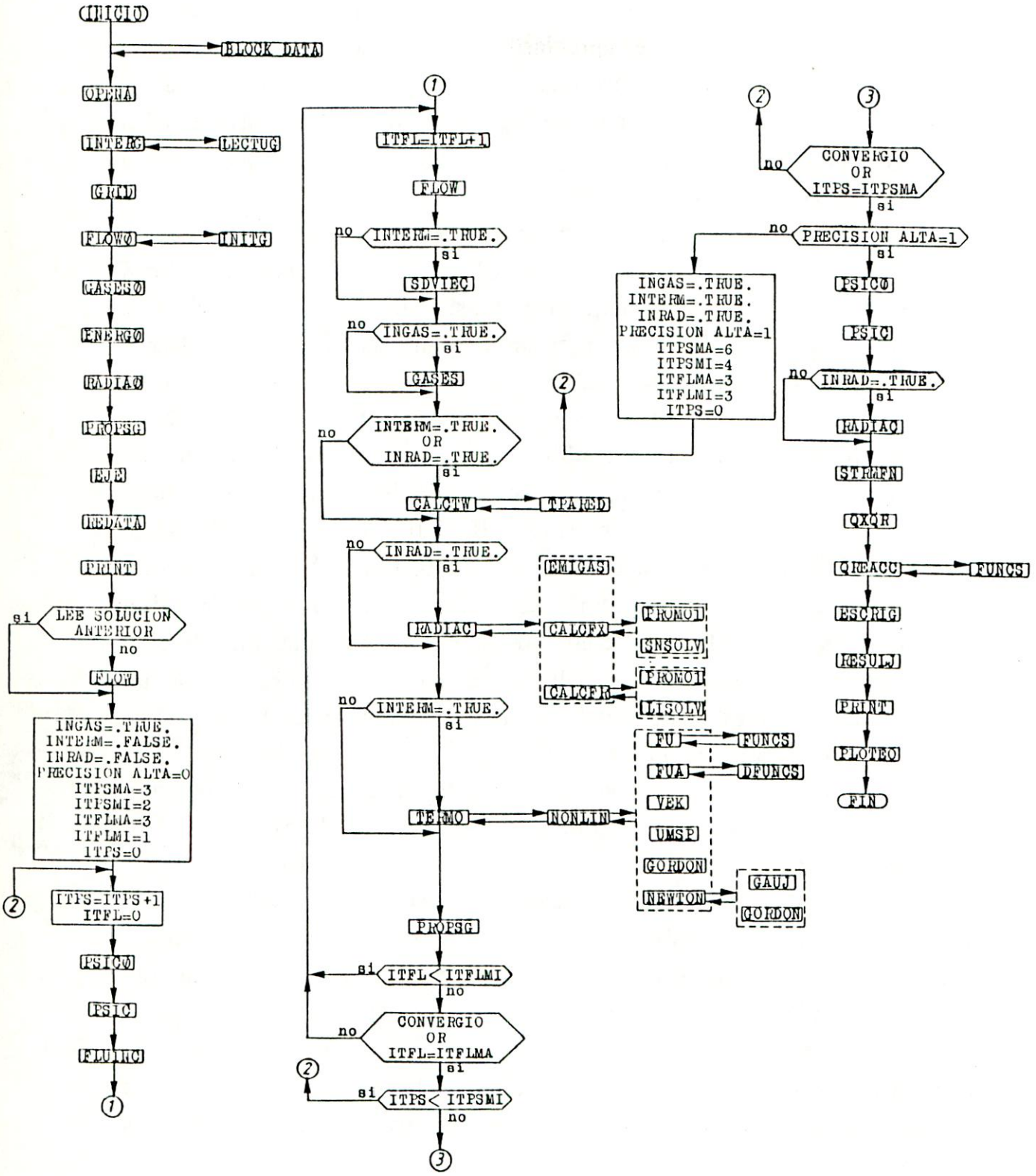


Fig. 7.1 Flujograma Principal de COMBUS2

antes de iniciar la resolución simultánea con la ecuación de energía. Alcanzada la convergencia de FLOW y GASES (o el número máximo de iteraciones) se retorna a PSIC y el proceso se repite hasta completar, al menos, un número mínimo de iteraciones o lograr convergencia.

Se pasa entonces a la etapa de alta precisión. En esta segunda ejecución del loop principal por cada llamada a PSIC se resuelve el campo de flujo (FLOW); se calculan las fuentes de disipación viscosa y energía cinética (SDVIEC); se llama a GASES para generar una estimación del campo de σ_i que sirve luego como estimación inicial a TERMO; se calcula la temperatura de pared (CALCTW); se resuelve el campo de radiación (RADIAC); y se resuelven simultáneamente las ecuaciones de especies y energía para cada punto de la malla (TERMO). Finalmente se recalculan las propiedades del gas y se repite 3 veces esta secuencia para asegurar que TERMO pueda propagar las modificaciones de las variables a través del campo solución. Se vuelve entonces al loop principal, se recalculan las trayectorias de las partículas (PSIC) y se repite el loop interior. La secuencia prosigue hasta lograr convergencia simultánea de todas las ecuaciones de conservación (y haber completado el número mínimo de iteraciones principales).

Es conveniente aclarar que todas las iteraciones a las que se hace referencia aquí son únicamente para el acople entre las soluciones de los diferentes campos de variables. Cada una de las subrutinas encargadas de esas soluciones son a su vez iterativas, demandando en algunos casos (FLOW, TERMO) cientos de iteraciones en cada llamada.

Al salir del loop se ejecutan por última vez PSIC y RADIAC para garantizar que ocupen el campo final de temperatura. Por último se determina la función de corriente del campo de flujo resultante (STRMFN), los campos de Qx y Qr (QXQR) y el calor de reacción de la combustión homogénea (QREACC). Se almacenan los resultados (ESCRIG, RESULT, PRINT) y se grafican las líneas de corriente (PLOTEO) en el archivo de resultados destinado al usuario (se genera además otro archivo de resultados para ser leído por el programa en posteriores ejecuciones a partir de los resultados obtenidos).

8. RESULTADOS

Se presentan aquí los resultados de una modelación completa realizada con el programa COMBUS2, a fin de ilustrar sus capacidades y las áreas que requieren mayor desarrollo. Las condiciones de simulación son las mismas que se emplearon en las pruebas de COMBUS, lo que otorga una base común de comparación con los resultados obtenidos por dicho programa. Tales condiciones se resumen a continuación.

-cámara de combustión:
longitud: 1.000[mm]
diámetro: 400[mm]
diámetro ducto aire primario: 20[mm]
diámetro ducto aire secundario: 44[mm]
semiángulo del difusor: 35°
paredes: espesor: 100[mm]
emisividad: 0,8
conductividad térmica: 1,3 [W/mK]
temperatura refrigerante: 323[K]
coef. de convección exterior: 25 [W/m^2K].

-aire inyectado:
Tabla 8.1

		aire primario	aire secundario
temperatura	[K]	373	573
velocidad axial,	u [m/s]	18 (cte)	28 (cte)
velocidad radial,	v [m/s]	0	0
velocidad tangencial,	w [m/s]	0	23 (cte)
flujo másico	[kg/hr]	19	75

-carbón:
tipo: bituminoso alto volátil C
flujo másico: 10 [kg/hr]
distribución inicial de tamaños: 8 clases de diámetros, según tabla 8.2

Tabla 8.2 fracciones másicas de cada clase de diámetro.

d_p [μm]	30	45	50	75	90	106	153	200
f_d %	36,2	4,7	6,2	7,9	9,1	11,2	16,0	8,7

En la fig. 8.1b se muestra un gráfico de la distribución acumulada de tamaños.

compuertas de ingreso de las partículas: 5 compuertas cuyas posiciones radiales son:

Tabla 8.3

n_c	1	2	3	4	5
r_c [mm]	2	4	6	8	10

-malla de discretización:

la malla de discretización se muestra en la fig. 8.1c. Consta de $N_i \times N_j = 23 \times 25$ nodos, de los cuales 422 quedan dentro del campo solución.

Según los datos de aire y carbón se tiene:

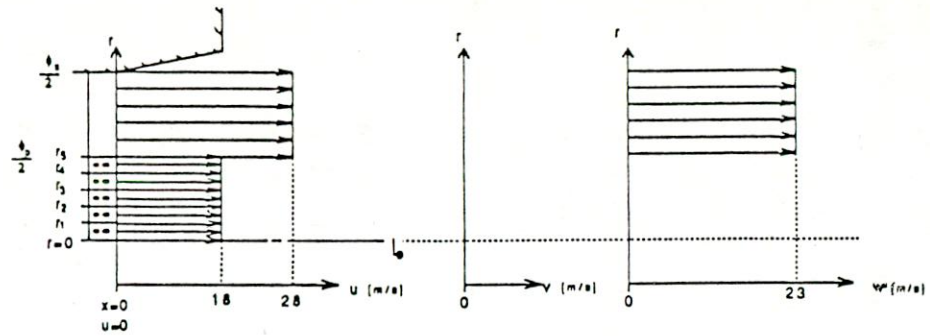
número de swirl, $S = 0,5$
relación de aire, $\lambda = 1,2$

Los resultados que se dan en lo que sigue se obtuvieron con 4 iteraciones de acoplamiento en baja precisión y 12 en alta precisión. Esto demandó en total aproximadamente 860 iteraciones en FLOW, 195 en GASES y 115 en RADIAC; las 12 llamadas a TERMO implican la resolución de 5.064 sistemas de 12 ecuaciones no lineales. Todo esto toma alrededor de 200[min] de CPU en el computador IBM 9375, lo que equivale a cerca de 6[hr] en tiempo real.

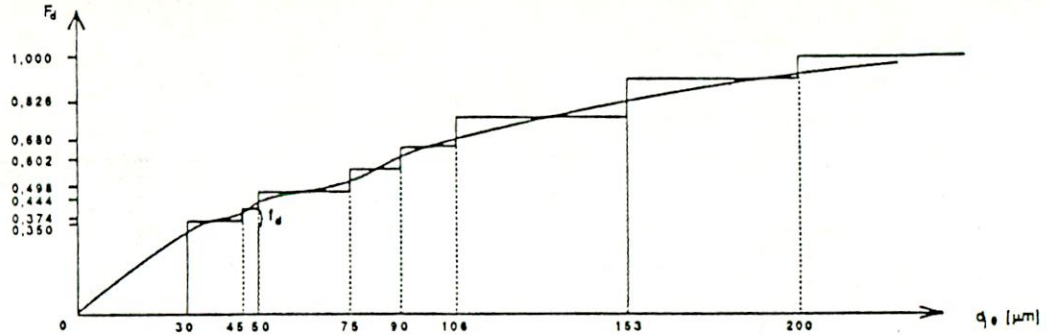
8.1 Campo de flujo

El campo de flujo resultante se muestra en las fig. 8.2-8.4. La primera ilustra el campo de velocidades del gas en el plano x-r a través de un diagrama de flechas y mediante las líneas de flujo. En la fig. 8.3 y 8.4 se grafican perfiles de las componentes u, v, w de la velocidad.

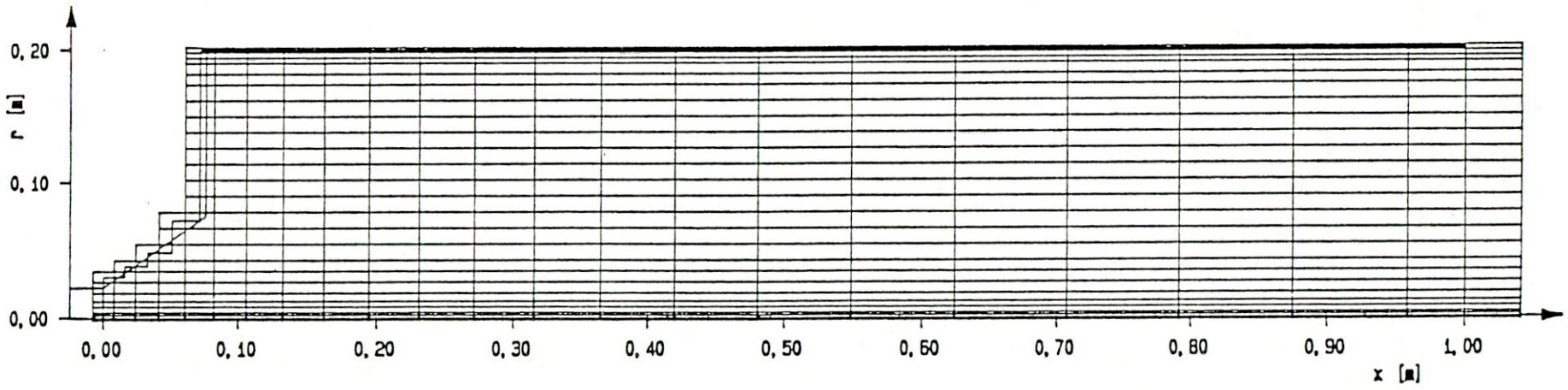
Se observa una intensa recirculación del flujo frente a la zona de entrada del gas, con elevados gradientes de velocidad y cambios bruscos en su dirección. La fuerza centrífuga debido a la rotación del fluido lo impulsa hacia la periferia, generándose una depresión en la zona de inyección que lo succiona de vuelta. Hacia la salida en cambio, la magnitud de la velocidad decrece gradualmente y el flujo tiende a ser uniforme. Por lo anterior, en x=0,1[m] a la altura de la zona de inyección, domina la componente



a



b



c

Fig. 8.1[9] a Perfiles de velocidad del aire inyectado.
b Distribución inicial de diámetros de partículas.
c Malla de discretización.

MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989

axial negativa de la velocidad, mientras que más hacia la periferia la velocidad llega a ser prácticamente radial. Sólo en esta región la componente radial toma valores apreciables; en x=0,2 [m] ya ha disminuido notoriamente y para x >0,4 [m] es casi nula. Por su parte, u tiende a ser constante hacia la salida, disminuyendo cerca de la pared debido a la presencia de la capa límite.

Los valores asignados a las líneas de flujo (fig. 8.2b) corresponden a la función de corriente adimensionalizada con respecto al caudal que ingresa al campo. Se aprecia que las líneas de corriente positivas se adhieren al principio a la pared norte, separándose hacia la salida y haciéndose paralelas al eje x (las líneas verticales en este y otros diagramas de isovalor de una cantidad sirven para conectar diferentes tramos de una línea, pero no representan el valor de la cantidad en los puntos que atraviesan). Por lo tanto, el gradiente radial de la función de corriente disminuye hacia la salida, en concordancia con la disminución de la velocidad axial. Las líneas más cercanas al eje se encuentran más separadas, mostrando la disminución de u en dicha dirección. Dentro de la zona limitada por la línea de valor 0, la función de corriente es negativa, indicando que el caudal neto a través de la sección transversal comprendida entre el eje y un punto dado en dicha zona es negativo (en este caso, en la dirección -x; usualmente la definición de signos del caudal es a la inversa). De este modo, las líneas positivas de la fig.8.2 muestran claramente la "vena fluida" de salida del gas hacia la región situada flujo abajo de la zona de recirculación. Además, la presencia de líneas con valor mayor que 1 muestra la disminución de la densidad del gas respecto a la que tiene al ingresar.

En la fig. 8.4 es posible notar que la posición radial para la cual la componente tangencial w es máxima se desplaza hacia la pared, al avanzar en dirección axial. Esto se puede atribuir principalmente a la difusión radial de momentum tangencial, dado que v sólo es considerable en los primeros 0,4[m] de la cámara de combustión. Más aún, en la zona de recirculación v es negativa, por lo que el transporte convectivo radial es hacia el eje. La conservación del momentum angular tiende a contrarrestar esto, induciendo un aumento de w si la velocidad radial es negativa (este efecto se aprecia en la ecuación 2.1c en la fuente $-\rho vw/r$, que corresponde a la fuerza de Coriolis).

Es destacable el hecho de que el campo de flujo resultante es muy similar al obtenido[9] con el código COMBUS, a pesar de la

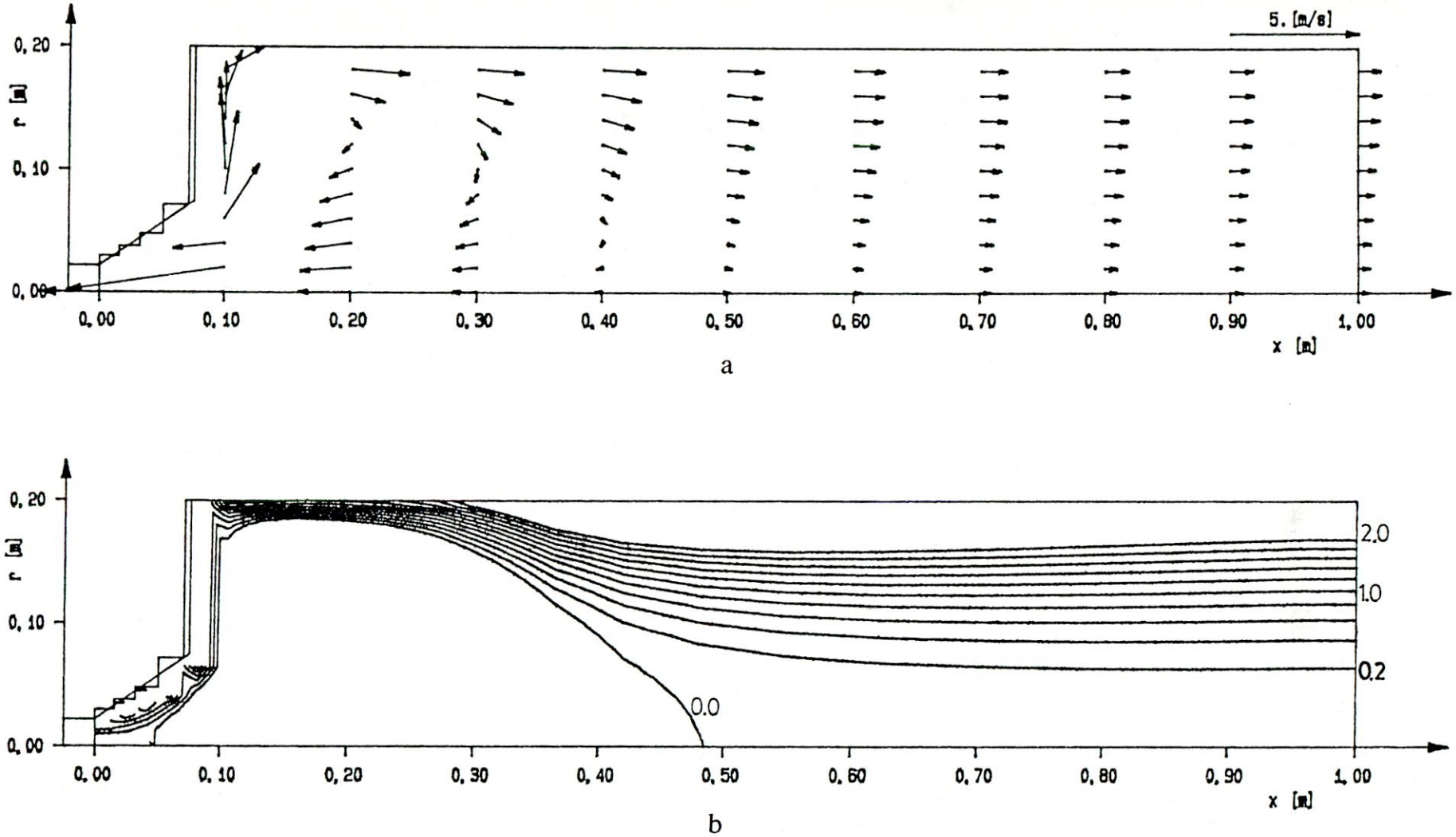
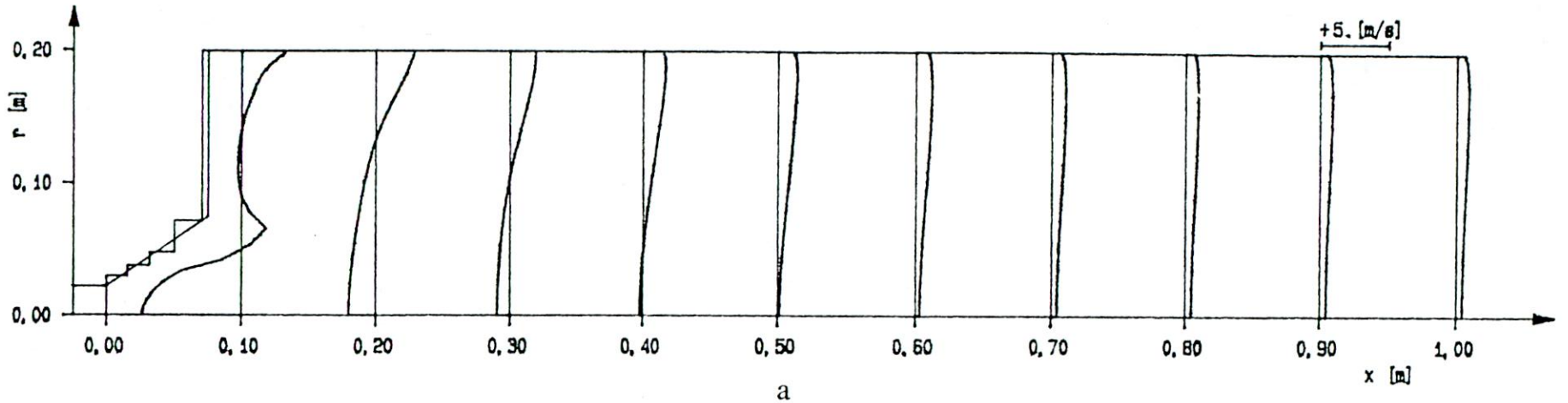


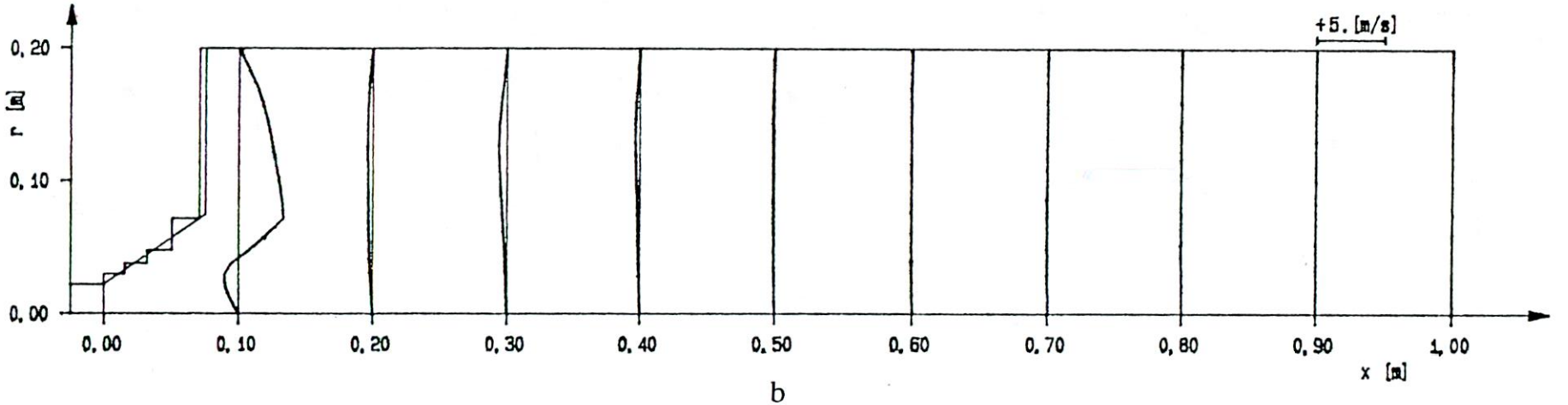
Fig. 8.2 a Campo de flujo del gas en el plano x-r.

b Líneas de flujo en el plano x-r (Valores para la función de coriente adimensionalizada con respecto al caudal de entrada).

MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989



a



b

Fig. 8.3 a Perfiles de la componente axial u de la velocidad del gas.

b Perfiles de la componente radial v de la velocidad del gas.

MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989

UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA
BIBLIOTECA CENTRAL
Inventario.....

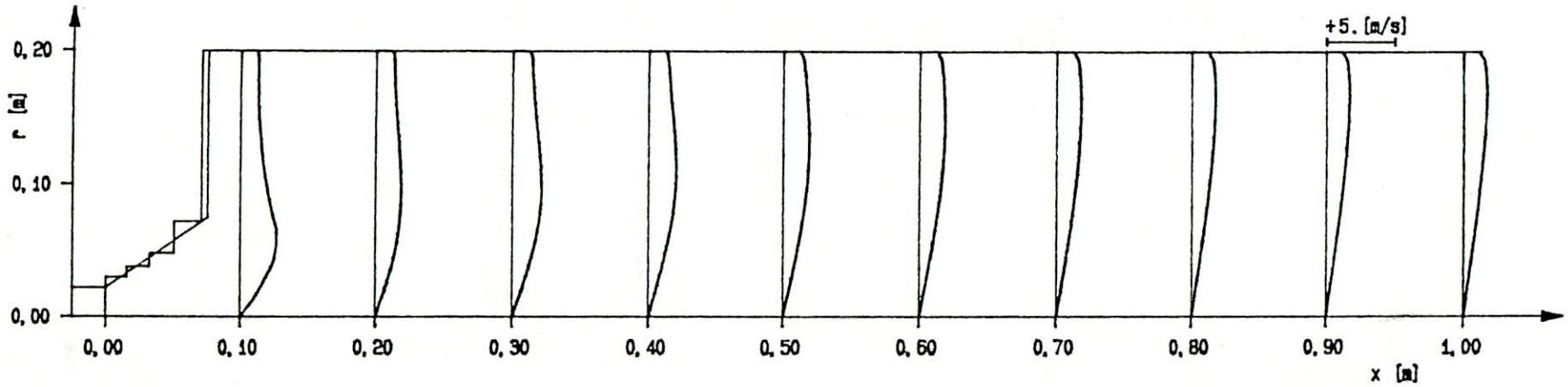
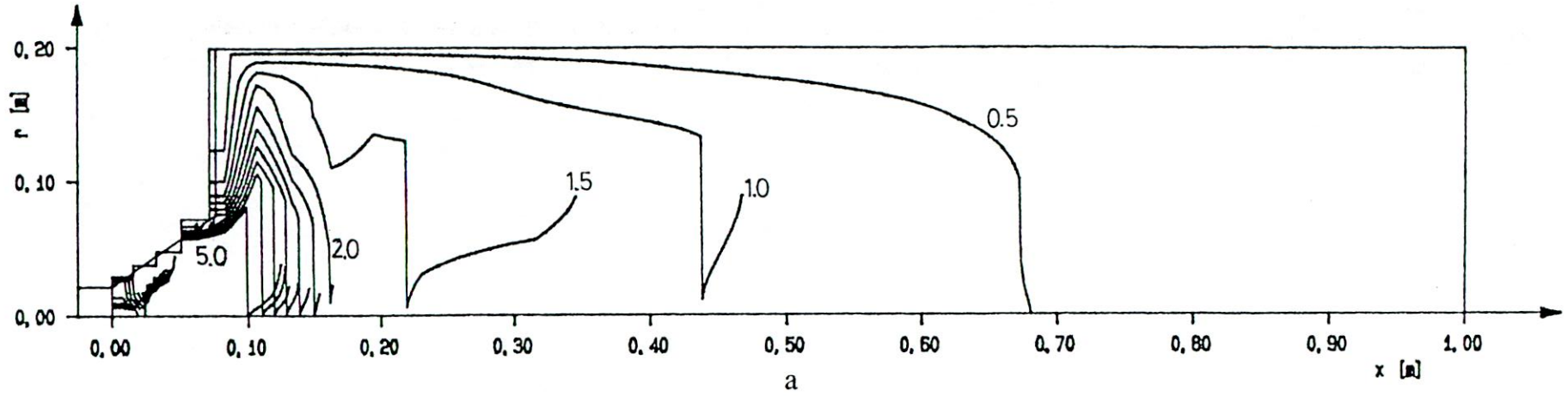
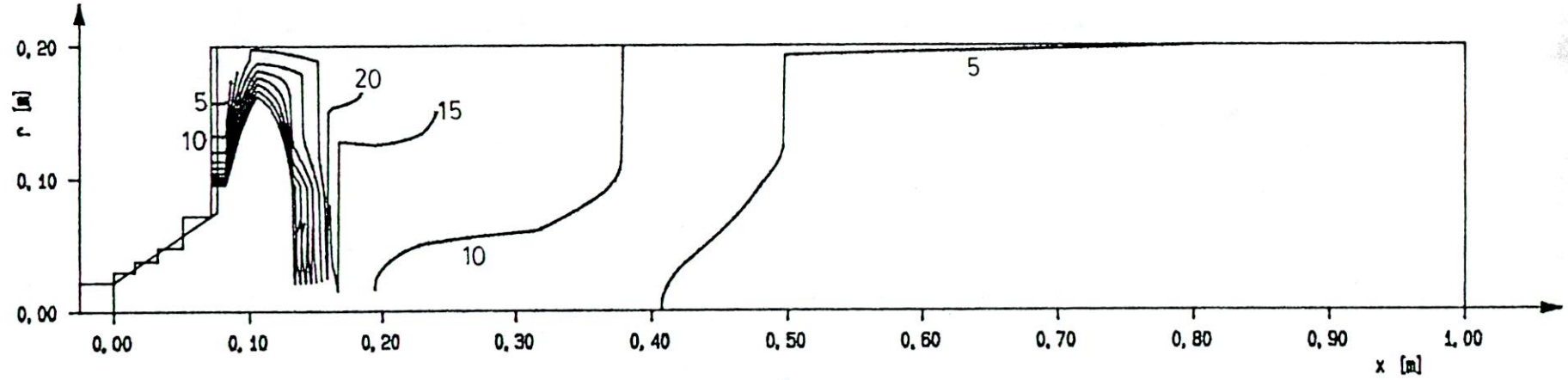


Fig. 8.4 Perfiles de la componente tangencial w de la velocidad del gas.



a



b

Fig. 8.5 Curvas de isovalor para:
a Energía cinética turbulenta k [J/kg].
b Disipación viscosa de energía cinética turbulenta ε, [J/kg s].

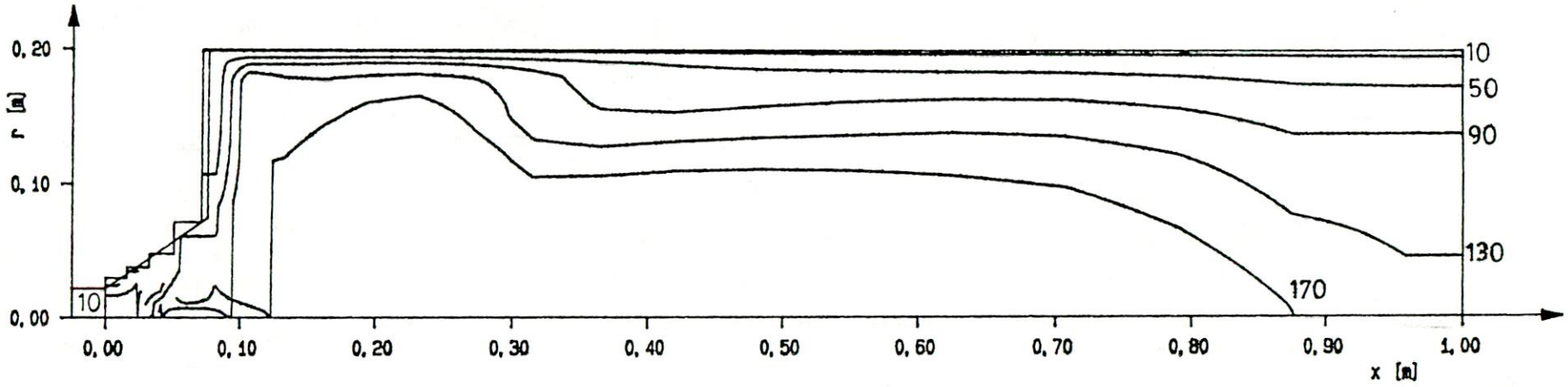
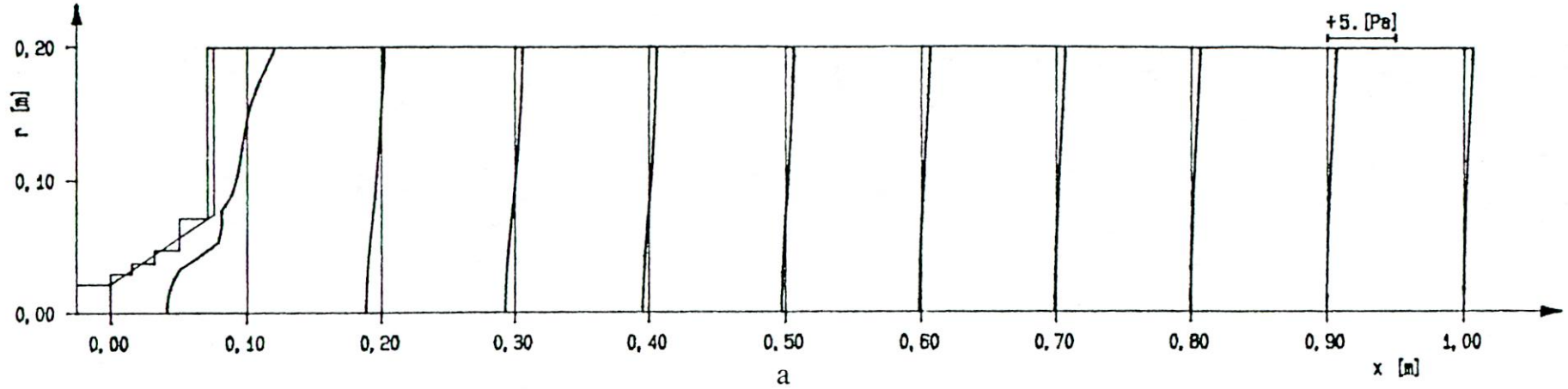
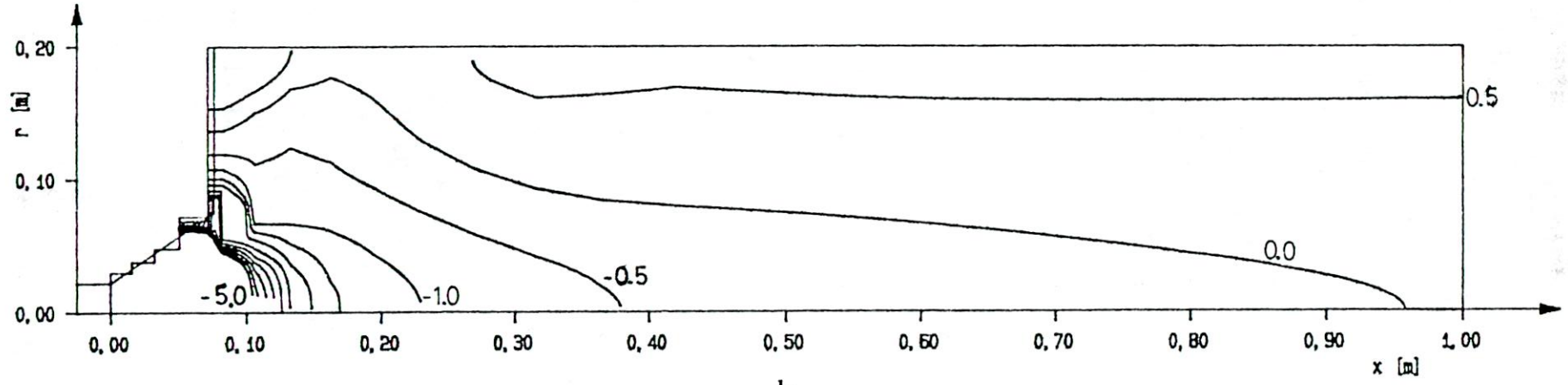


Fig. 8.6 Curvas de isoviscosidad efectiva, adimensionalizada con respecto a la viscosidad laminar, $\mu_l = 1{,}8 \cdot 10^{-5}$ [kg/s m]



a



b

Fig. 8.7 a Perfiles de presión manométrica p

b Curvas de isopresión manométrica p, [Pa].

MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989

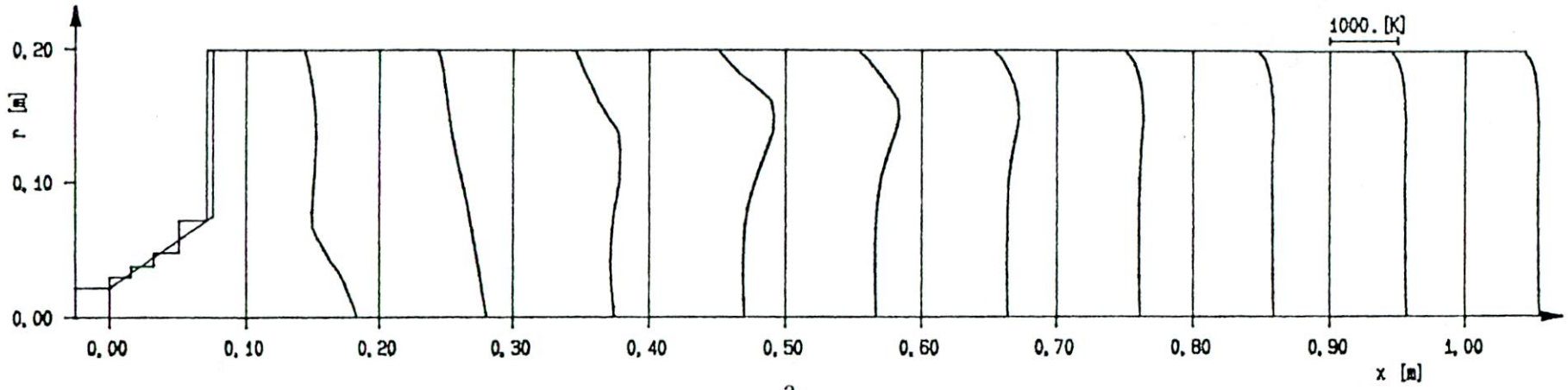
considerable diferencia en los campos de temperatura. Esto indica que el acoplamiento de los campos de flujo y térmico, al menos para las condiciones de esta modelación, podría considerarse, hasta cierto punto, unidireccional, de modo que si no requiere gran exactitud en los resultados, es factible desacoplar el campo de flujo del resto del modelo, es decir, revolverlo sólo al principio y mantenerlo constante durante la resolución de las restantes ecuaciones de conservación. Tal procedimiento es empleado en la ref.[3] con resultados satisfactorios y supone un ahorro considerable en tiempo de computación.

La fig. 8.5 muestra curvas de isovalor de energía cinética turbulenta k, y su disipación ε . Se aprecia que k es máxima en la zona de inyección como es de esperarse, pues allí son máximos los gradientes de velocidad que determinan la producción de k. Se advierte, además que a mayor k, mayor es también ε, por lo cual el gradiente de k disminuye rápidamente al alejarse del extremo de entrada.

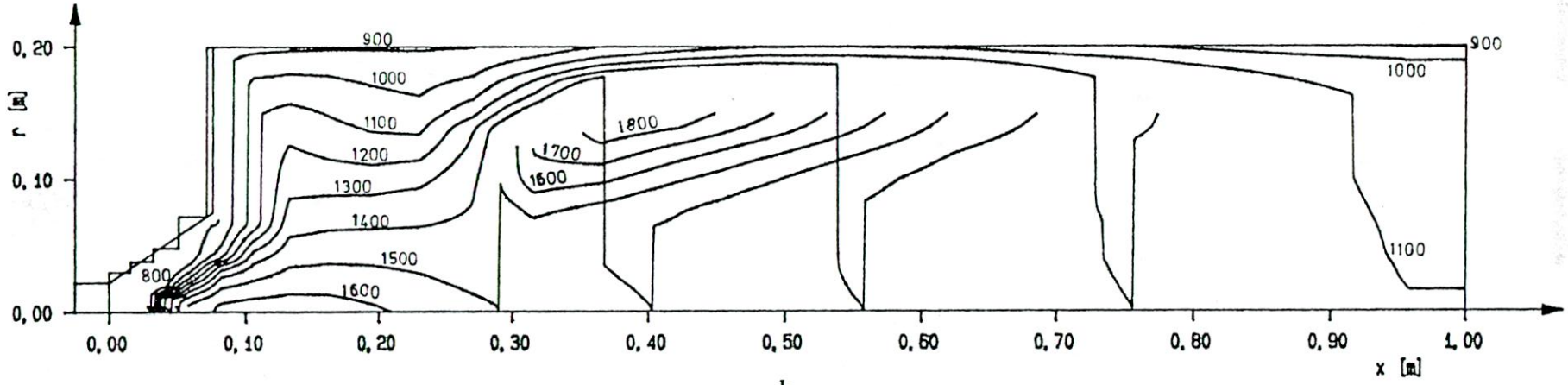
En la fig. 8.6 se tienen líneas de isoviscosidad efectiva adimensionalizada con respecto a la viscosidad laminar. Queda claramente de manifiesto que el fenómeno difusivo esta dominado por la turbulencia y no por el transporte molecular. El campo de presión se ilustra en la fig. 8.7 donde se puede ver la depresión, en la zona de inyección, que provoca la recirculación.

8.2 Variables termoquímicas

La fig 8.8 muestra el campo de temperatura obtenido. Este define básicamente una llama abierta, como cabe esperar del campo de flujo y de los trayectorias de las partículas (fig. 8.16). La zona de máxima temperatura se localiza hacia la periferia de la cámara de combustión, debido a que las partículas al ser arrastradas por el flujo de gas son desviadas primero hacia la pared norte, a través de una zona de temperatura relativamente baja, y dirigidas luego hacia el centro, donde aumenta fuertemente su rapidez de desvolatilización. Se tienen allí, por lo tanto, las mayores fuentes de especies que alimentan la combustión homogénea, la cual se torna más intensa, provocando el aumento de temperatura. Existe además una zona de alta temperatura hacia el SW del campo, lo que puede atribuirse a la alta recirculación de los volátiles desde la zona superior hacia la entrada, cuya combustión se hace más intensa a medida que



a



b

Fig. 8.8 a Perfiles de temperatura del gas, T.
b Curvas de isotemperatura del gas, T [K].

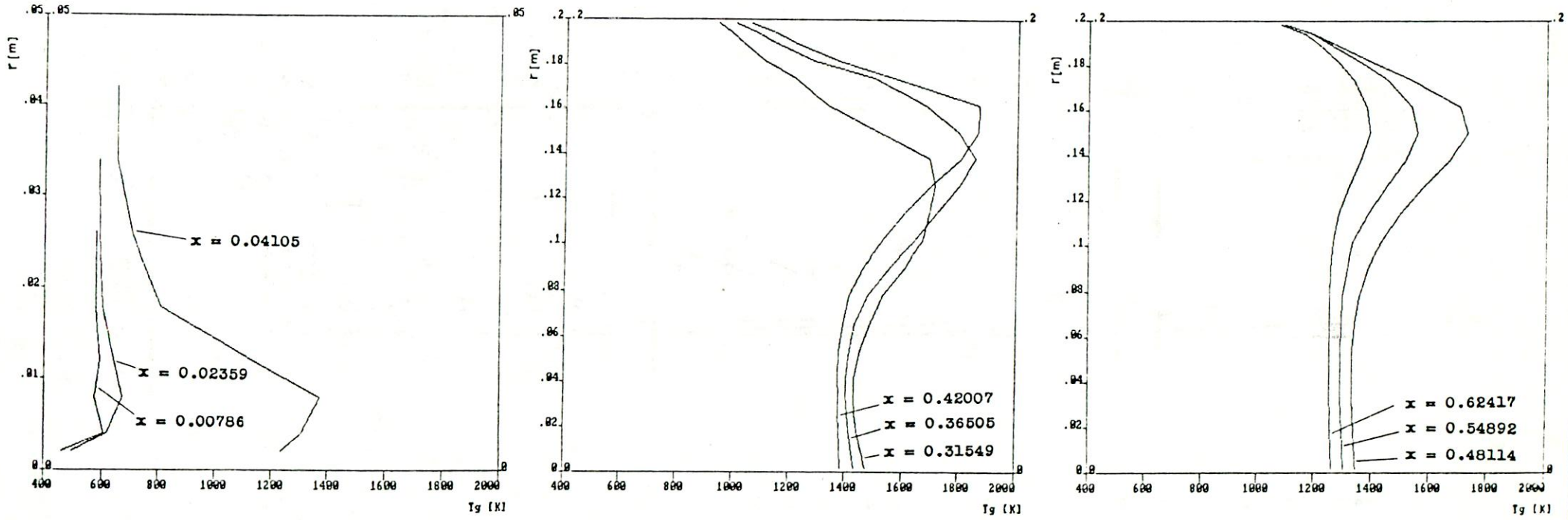


Fig. 8.9 Perfiles de temperatura del gas para las posiciones axiales x[m] que se indican.

ingresan en regiones más ricas en oxígeno. Por otra parte, se puede presumir también que la elevación de temperatura en esta segunda zona sea un remanente de la estimación inicial del campo de temperatura debido a un número insuficiente de iteraciones (esto puede surgir por multiplicidad de la solución[2], i.e. habría más de un estado de equilibrio dinámico, los cuales son físicamente posibles aunque no todos estables, por lo que el sistema puede converger a una solución de alta temperatura donde exista además una de temperatura menor). Los resultados parciales de estas iteraciones muestran, no obstante, una tendencia a estabilizarse, por lo que aún con un número mayor de iteraciones, las temperaturas en la zona en cuestión no serían substancialmente diferentes de las obtenidas.

Los perfiles radiales de temperatura muestran que ésta tiende a hacerse uniforme hacia la salida, debido a la mezcla turbulenta, persistiendo solamente el descenso de temperatura en la zona próxima a la pared norte, por la transferencia de calor hacia ella. En la fig. 8.9 se dan algunos perfiles radiales de temperatura con mayor resolución. En el primer gráfico se advierte que la ignición del gas se produce entre $x \approx 0{,}02$[m] y $x \approx 0{,}04$[m] (el cambio abrupto de pendiente en estas curvas se debe a que la malla no es lo suficientemente fina para los gradientes térmicos que se dan en la entrada). Como puede verse por la proximidad de las isotermas, tales gradientes son máximos en dicha zona y en la comprendida entre el foco de mayor temperatura y la pared norte.

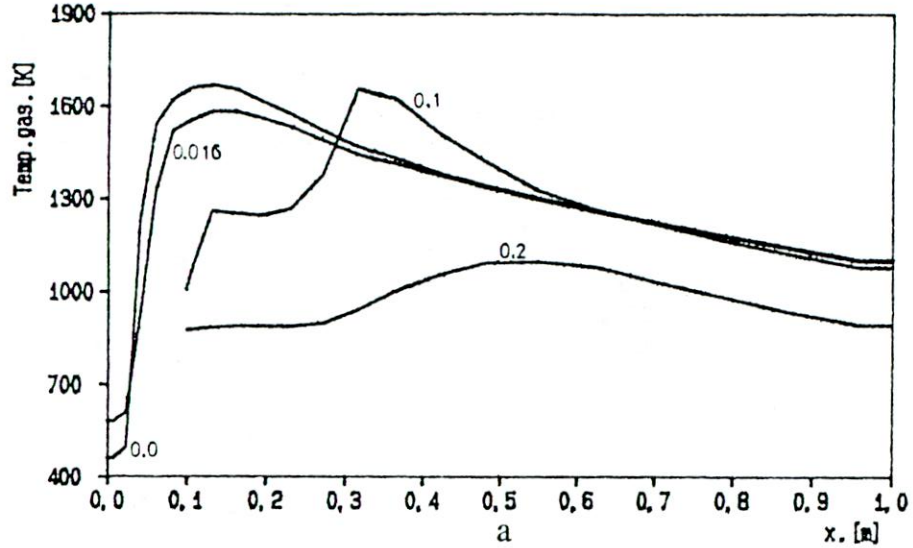
Lamentablemente no se cuenta con información experimental para condiciones similares a las simuladas, de modo que solo es posible una comparación más bien cualitativa con resultados experimentales. La fig.8.10b corresponde a la temperatura del gas medida a lo largo del eje de una llama de carbón pulverizado[9]. De aquí se tiene que las temperaturas en la llama fluctúan entre 1577-1900[K], rango similar al obtenido en la zona de máxima temperatura. En la fig. 8.10c se dan perfiles radiales de temperaturas medidas y calculadas[35] para una llama de gas natural con S=0,5. En la mayoría de dichos perfiles la temperatura aumenta desde el eje hacia la periferia hasta un valor máximo y luego disminuye, tendencia que también presentan los perfiles radiales calculados en este trabajo, y que indican una llama abierta. Se aprecia además que la temperatura sobre el eje crece hasta un máximo en $x/D_f=0{,}33$ (con D_f el diámetro del horno)

posiblemente debido a la recirculación del gas medida en esa zona (el aumento en sentido radial después del mínimo en los tres primeros perfiles son igualmente atribuibles a la recirculación formada en esa otra zona; esta situación no se da en la presente modelación). Hacia la salida se tiene un aplanamiento del perfil de temperatura con un descenso mayor en la proximidad de la pared, comportamiento coincidente con el obtenido.

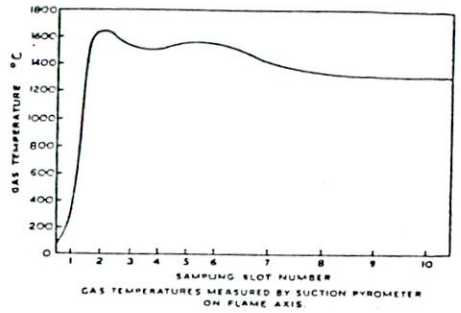
Algunas curvas de variación axial de temperatura, masa molecular y densidad del gas se dan en la fig. 8.10. La masa molecular es mínima en x=0,36[m], consecuente con el que la concentración de especies livianas, principalmente H_2, es máxima en esa posición. A pesar de esto la variación relativa de la masa molecular es reducida comparada con la de la temperatura; de aquí que la densidad muestre, aproximadamente, un comportamiento inversamente proporcional a la temperatura.

En la fig. 8.11 y 8.12 se presentan las fracciones molares de las principales especies químicas en la mezcla, para diferentes posiciones radiales; en la primera se incluyen como referencia, resultados experimentales tomados de la literatura[2,9]. El comportamiento del modelo químico es similar al ya observado en las pruebas de COMBUS. La tendencia de la curva de CO_2 en la fig. 8.11a es parecida a la que aparece en la fig. 8.11d, mientras que lejos del eje (fig. 8.12) se asemeja a la de la fig. 8.11c, donde la aparición de CO_2 es más tardía. En este último caso, el aumento de CO_2 se puede asociar a la mayor concentración de CO que es oxidado a CO_2, y al CO_2 producto de la combustión heterogénea. En el eje, en cambio la presencia inicial de CO_2 se explica por la recirculación de CO_2 formado flujo abajo, y la oxidación de CO recirculado.

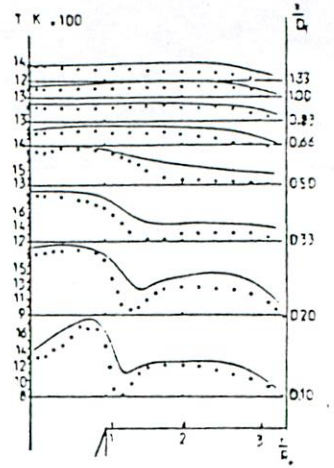
El perfil de CO, para posiciones alejadas del eje de simetría, se ajusta en su tendencia a la que aparece en la fig. 8.11c (no así con la fig.8.11d), mientras que sobre el eje su concentración es bastante menor (en la escala del gráfico 8.11a es imperceptible). Esto está en concordancia con las trayectorias abiertas que siguen las partículas de carbón. Para el H_2, por el contrario, las concentraciones resultantes son excesivamente altas, demostrando que la reacción de esta especie queda mal descrita por el modelo de combustión. La fig. 8.11d muestra que el H_2 se quema rápidamente; en el modelo de combustión simplificado en cambio, la rapidez de reacción global de H_2 queda muy subestimada por la omisión de reacciones paralelas a las



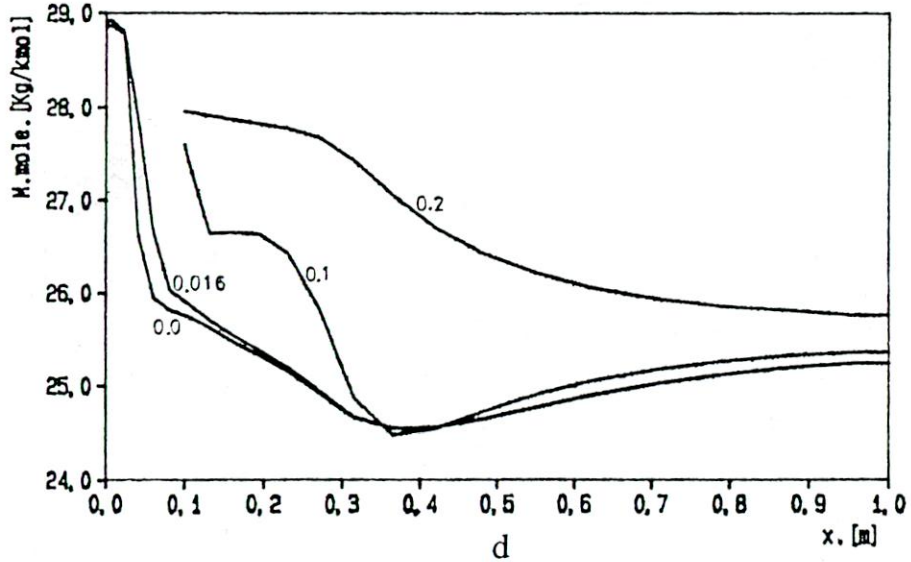
a



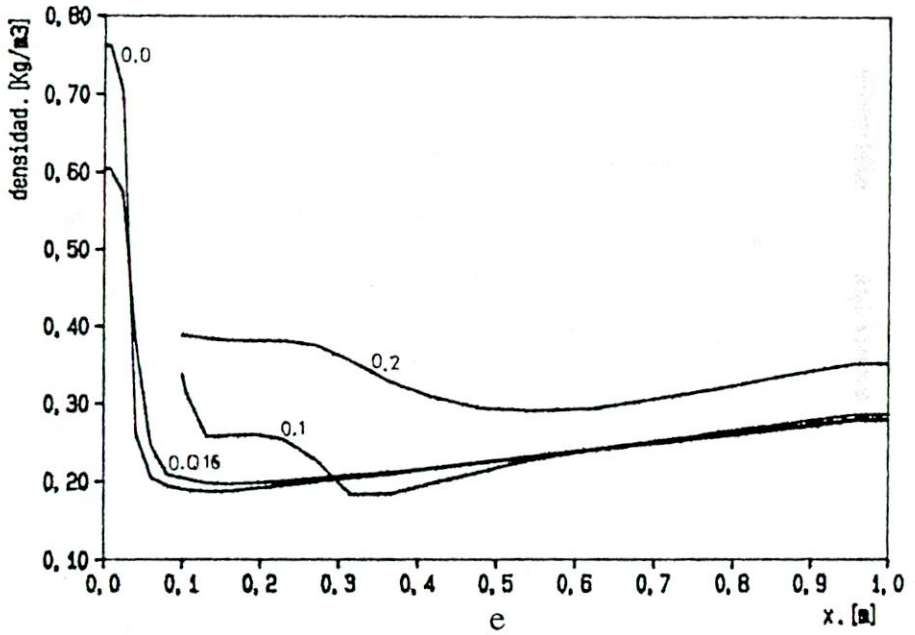
b



c



d

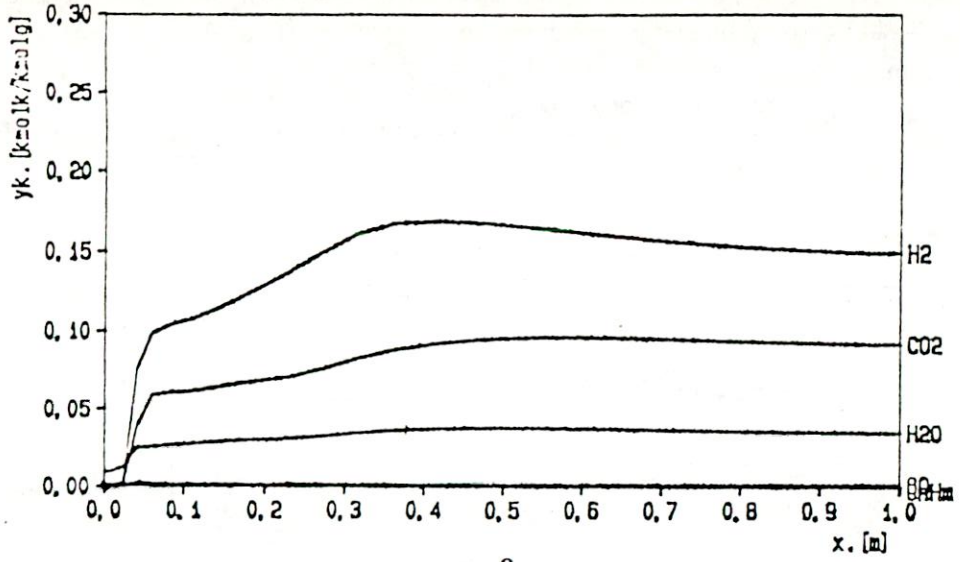


e

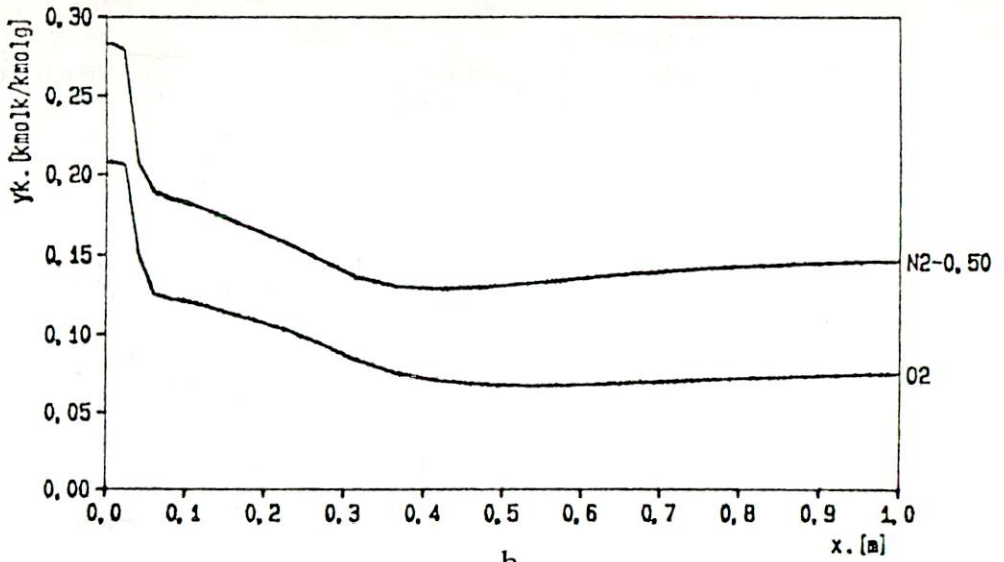
Fig. 8.10 a, d, e Curvas axiales de temperatura, masa molecular y densidad del gas, para las posiciones radiales que se indican, [m].

b Variación axial de temperatura medida en una llama de carbón pulverizado[9].

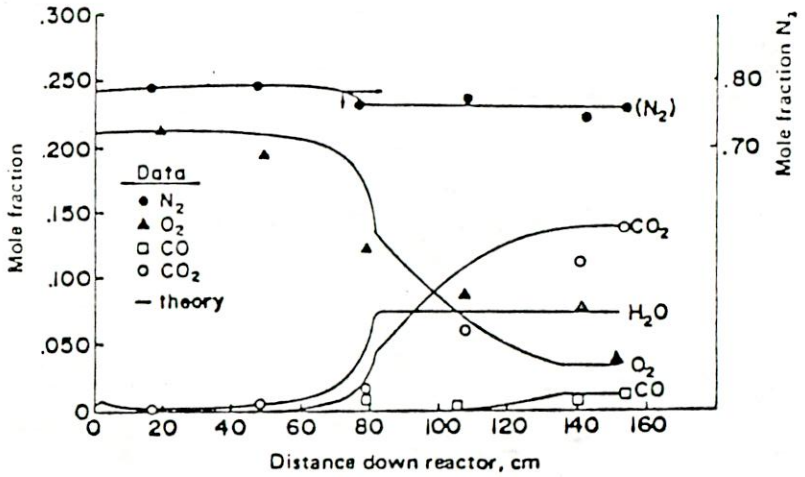
c Perfiles radiales de temperatura medidos (·) y calculados (-) para una llama de gas natural[35].



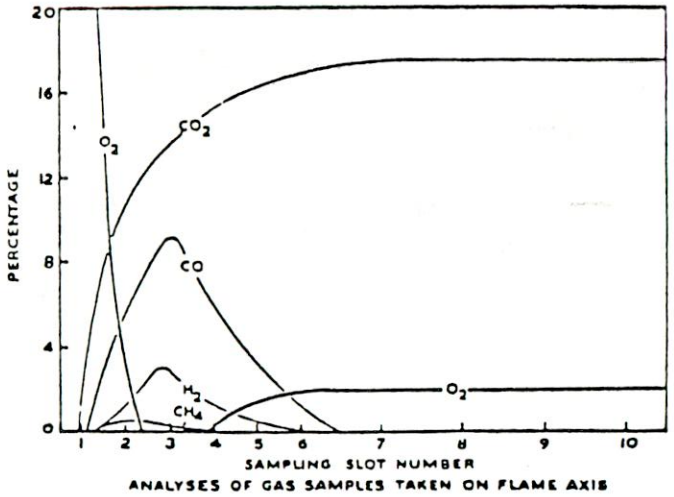
a



b



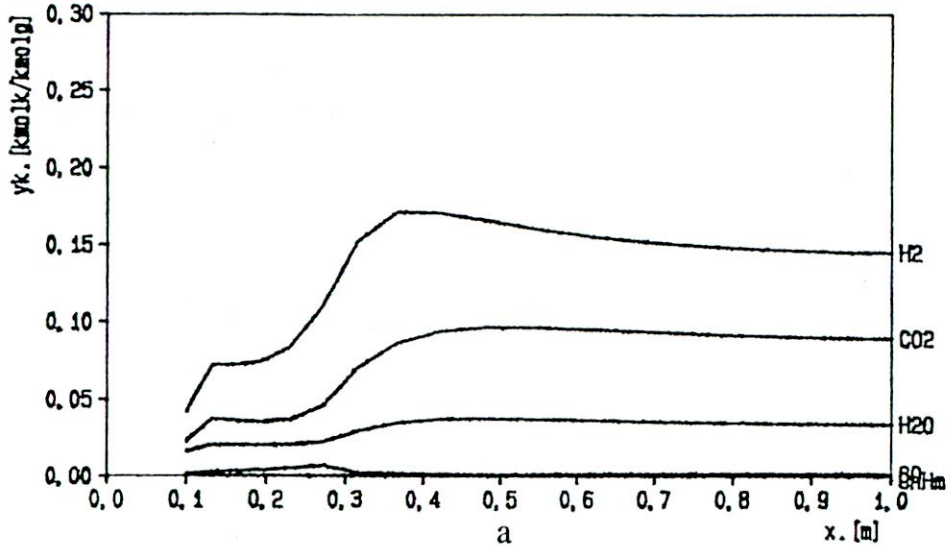
c



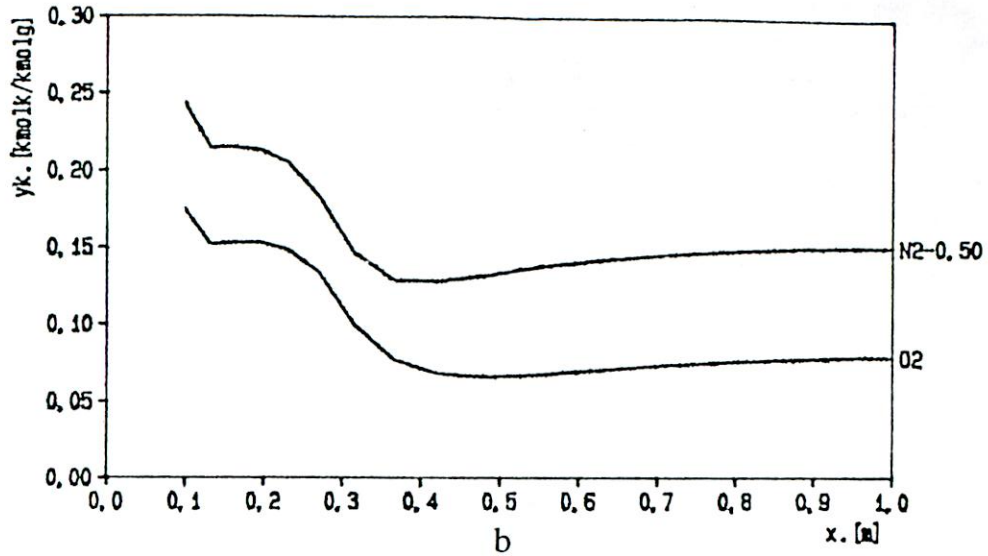
d

Fig. 8.11 Perfiles axiales de fracciones molares.
a,b obtenidos para r=0 [m].
c medidas en un horno y calculadas según un modelo unidimensional[2].
d Medidas en el eje de una llama de carbón pulverizado[9].

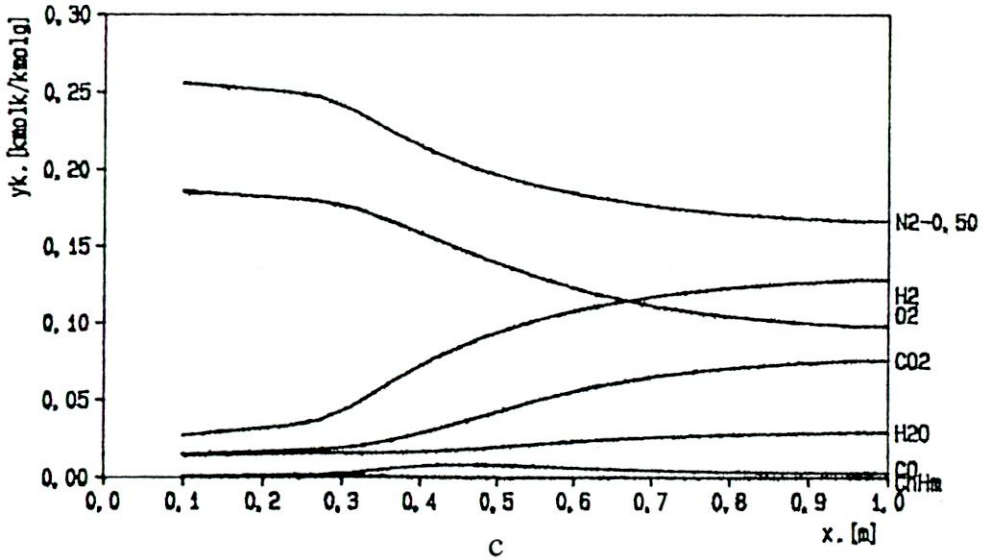
MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989



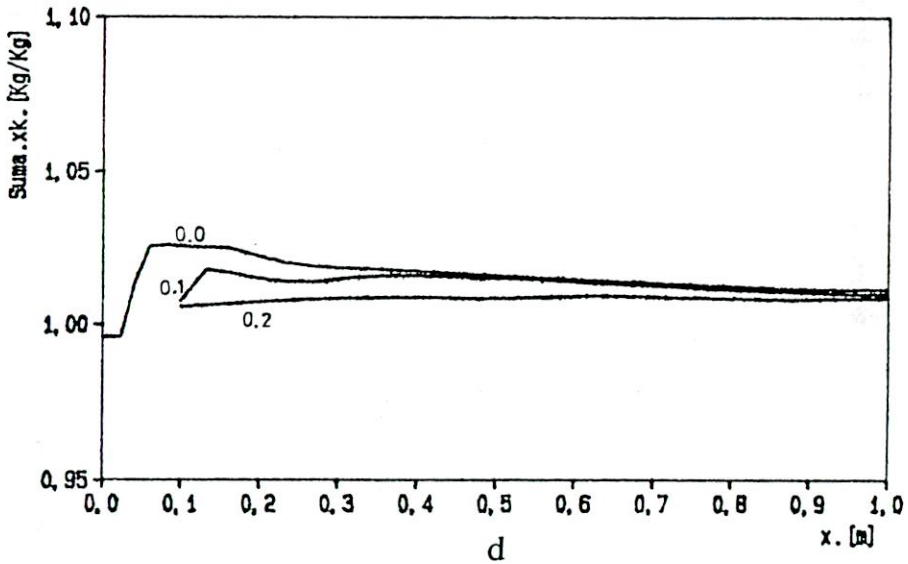
a



b

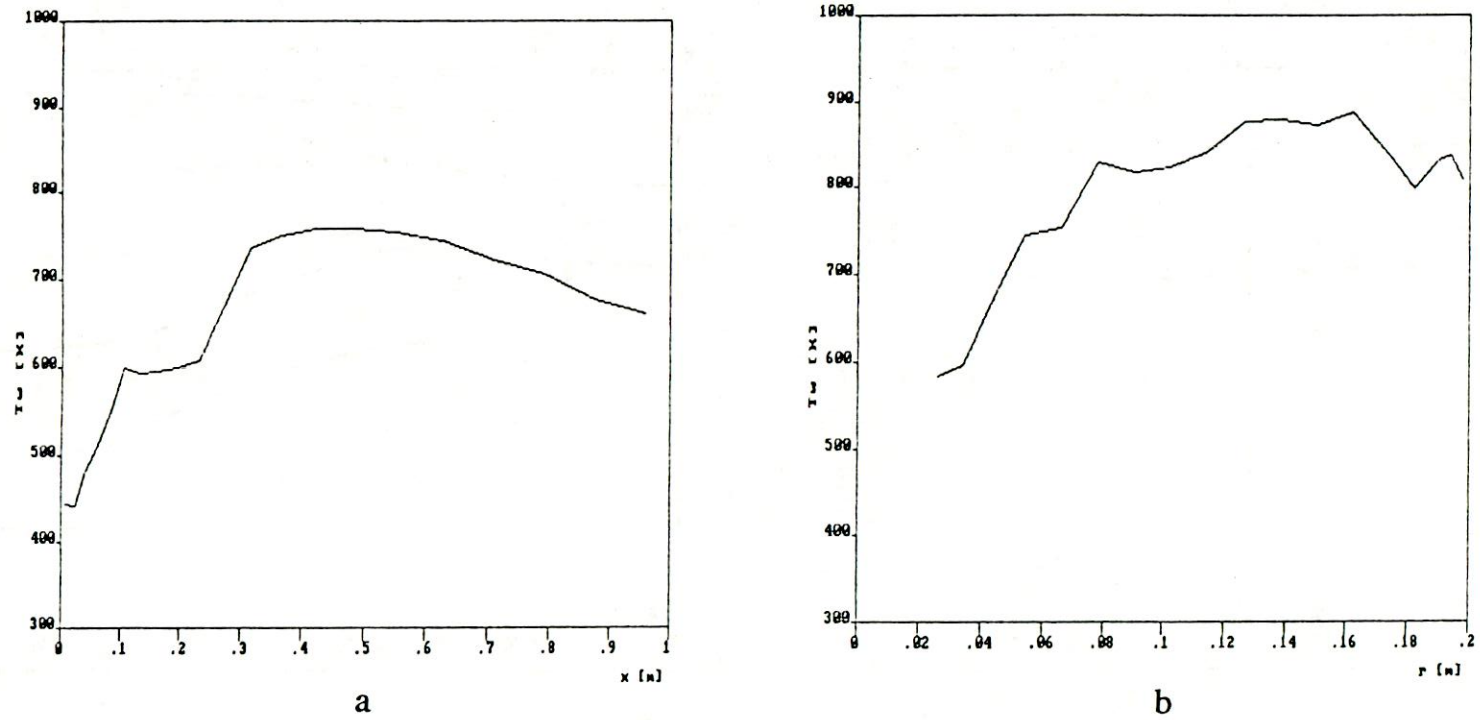


c



d

Fig. 8.12 Perfiles axiales de fracciones molares
a,b obtenidas para r=0,1 [m].
c obtenidas para r=0,2 [m].
d suma de las fracciones másicas de los componentes del gas.



a b

Fig. 8.13 a Perfil axial de temperatura de pared norte.
b Perfil radial de temperatura de pared oeste. [K]

consideradas. Consecuencia de esto es la baja concentración de H_2O, ya que ésta se origina, en este caso, exclusivamente por la combustión de H_2 (sin contar la evaporación de humedad de las partículas).

La concentración de C_nH_m es casi nula en la mayor parte del campo a pesar de que la emisión de volátiles constituye una fuente importante de esta especie. La brusca disminución de su concentración en varios órdenes de magnitud (que no puede visualizarse en los gráficos) indica una combustión muy rápida.

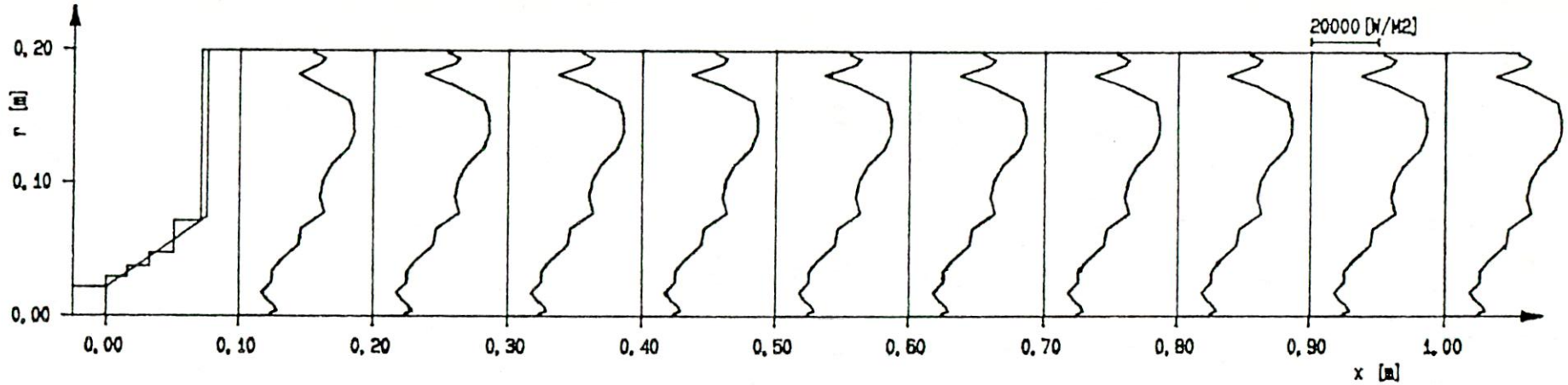
Las tendencias de las curvas O_2 y N_2 son parecidas a las que muestra la fig 8.11. En el eje la mayor rapidez de consumo de O_2 se da en la zona de ignición inicial; para r=0,1[m] ocurre en la zona de máximas temperaturas. La disminución de la fracción molar de N_2 se debe a la aparición de nuevos componentes del gas en el interior de la cámara de combustión.

En la fig. 8.12d se da la sumatoria de las fracciones másicas de cada componente del gas, la cual obviamente debe ser igual a 1. se ve que la desviación máxima de tal valor se produce sobre el eje, con 1,026; hacia la salida las curvas tienden a 1,01. La igualdad a 1 de estas fracciones másicas no se ha establecido como condición explícita en el sistema de ecuaciones, por lo que la buena aproximación a ese valor refleja el cumplimiento de las ecuaciones de conservación de especies y la validez de los resultados desde ese punto de vista. Las fallas observadas son imputables pues sólo al mecanismo de reacción homogénea y no a falta de acoplamiento entre las ecuaciones de conservación.

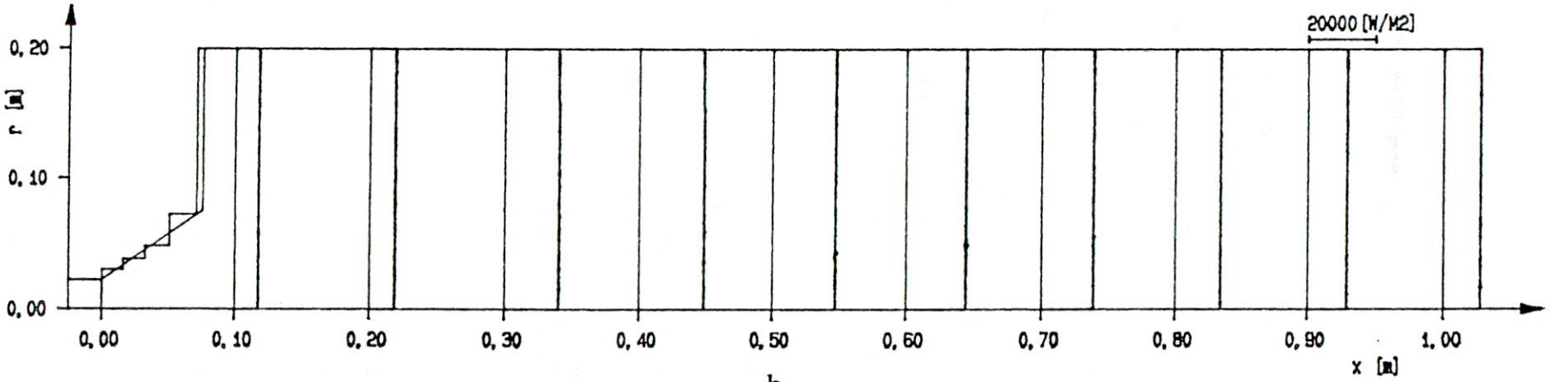
La temperatura de las paredes se entrega en la fig. 8.13. Las máximas temperaturas de la pared norte hacia $0,4 < x\ [m] < 0,5$ y de la pared oeste hacia $r \approx 0,16$ [m] son consecuentes con la posición de la llama. Los valores obtenidos para la pared norte son, en general, menores que los que se registran normalmente, debido posiblemente a los bajos niveles de radiación incidente (como se verá en la siguiente sección). Para la pared oeste las temperaturas son más elevadas debido a la ausencia de refrigeración y la mayor intensidad de radiación.

8.3 Campo radiativo

Los resultados para Fx y Fr se muestran en la fig. 8.14. En conformidad con la ubicación de la llama, los mayores flujos medios de radiación se tiene alrededor de $r \approx 0,15$ [m] y $0,4 < x\ [m] < 0,5$. Es claro que dFx/dx y dFr/dr son casi nulos, como lo

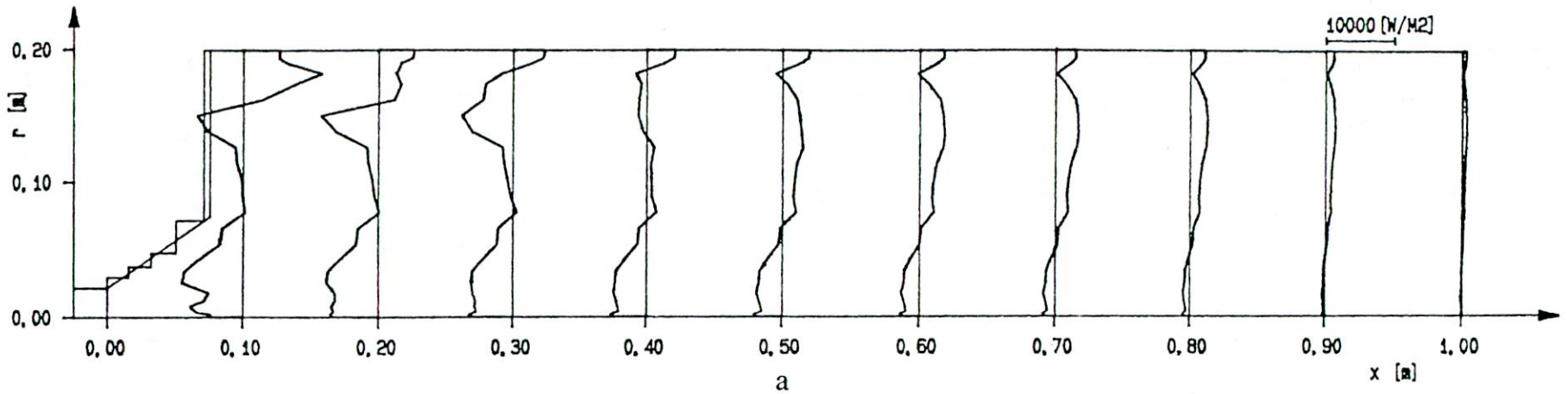


a

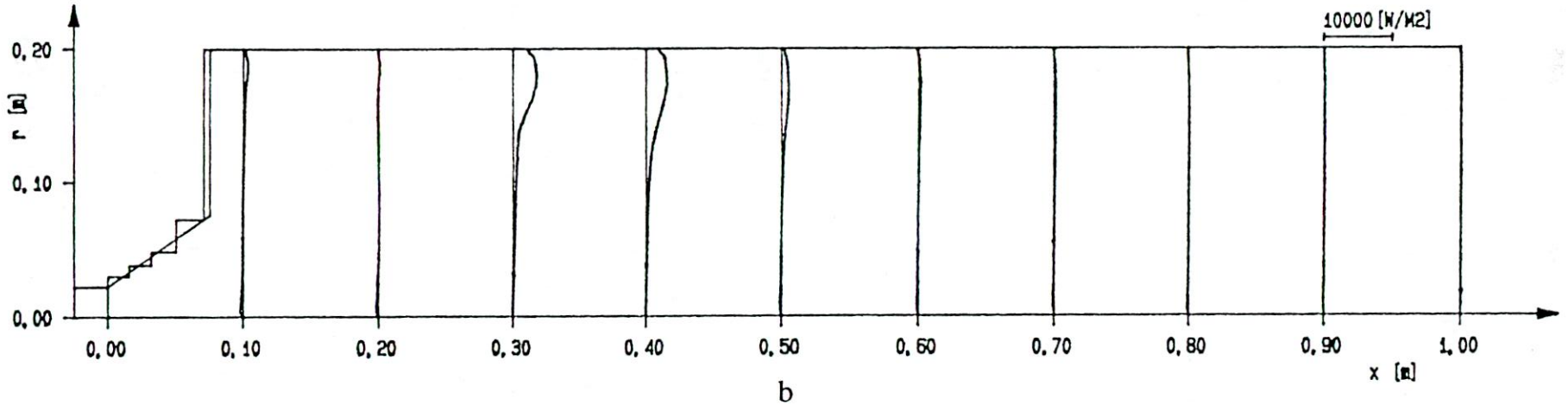


b

Fig. 8.14 a Perfiles de flujo radiativo medio axial, Fx.
b Perfiles de flujo radiativo medio radial, Fr.



a



b

Fig. 8.15 a Perfiles de flujo neto radiativo axial, Qx.

b Perfiles de flujo neto radiativo radial, Qr.

MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989

UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA
BIBLIOTECA CENTRAL
Inventario: .....

demuestra la persistencia en dirección axial del perfil de Fx y la planitud de los perfiles de Fr, indicando que el medio se comporta prácticamente transparente a la radiación. Esto es consecuencia de la no inclusión del hollín, cuya influencia en llamas de carbón pulverizado supera con creces la del gas. Por lo mismo, los valores obtenidos para los flujos netos de radiación (fig. 8.15) son muy inferiores a los que se dan normalmente. En pruebas efectuadas sumando al coeficiente de absorción calculado una contribución hipotética por hollín, los flujos calculados resultaron mucho mayores. No obstante, tal procedimiento no se incluyó finalmente en el programa para evitar suposiciones arbitrarias: una concentración y distribución de hollín sin interacción con parámetros básicos de los cuales depende.

En la fig. 8.15 se aprecia que los mayores flujos netos axiales se tiene en los primeros 0,3 [m] de la cámara de combustión en dirección -x, principalmente en torno a $r \approx 0{,}15$ [m] y frente a la zona de inyección. En el primer caso se trata de la radiación desde la región de máximas temperaturas hacia la pared oeste; en el segundo, la elevación del flujo neto hacia la entrada es producto de la gran diferencia de temperatura entre dicha frontera y el interior. Esta radiación hacia la entrada es muy importante por cuanto permite encender las partículas que ingresan al combustor. Para $x > 0{,}5$ [m] el flujo axial en dirección +x muestra la radiación de la llama hacia la salida, mientras que el flujo axial positivo en la esquina NW es causado por el carácter perfectamente rerradiante que se ha supuesto para la pared oeste (dado por la ausencia de refrigeración). En la mayor parte del campo el vector q_R esta dominado por la componente axial. Sólo en la zona comprendida entre la pared norte y la de máxima temperatura, los flujos radiales son comparables a los axiales.

8.4 Partículas

Finalmente se presentan los resultados relativos al movimiento de las partículas de carbón. En la fig. 8.16 se muestran las trayectorias de las partículas para las 5 compuertas de entrada y 4 de los 8 diámetros considerados, y para todos las partículas que ingresan por la compuerta $n_c=5$. Como se dijo en 8.2, las partículas arrastradas por el campo de flujo, se alejan rápidamente del eje y se mueven próximas a la pared norte conformando así una llama abierta. La zona de recirculación curva

las trayectorias hacia el centro; la mayoría de las partículas se quema alrededor de x=0,4[m] sin llegar a recircular. Sólo las partículas más grandes logran aproximarse más a la salida antes de quemarse completamente (se considera que la partícula se ha quemado cuando su masa alcanza un valor residual correspondiente a su contenido de ceniza). Se ve además que las trayectorias se concentran en un haz estrecho sin dispersarse en forma apreciable. Esto indica que el efecto de la difusión turbulenta sobre las partículas es reducido comparado con el del arrastre aerodinámico, lo cual es atribuible a que su tiempo de residencia en la mayoría de las celdas por las que cruzan es varias veces menor que el tiempo característico de la turbulencia imperante en ellas. Hay que consignar también que la constante C_k=0,1 utilizada en la modelación de la difusión turbulenta se basa en un análisis no muy riguroso de la ref.[7]. En dicho trabajo se muestra que para C_k=0,3 la difusión aumenta notablemente, considerándose que el valor óptimo se halla entre 0,1 y 0,3.

La fig. 8.17 ilustra curvas de decaimiento másico para algunos tamaños modelados, con n_c=5. Para esas mismas partículas se dan fracciones másicas de carbón sin reaccionar y coque en la fig. 8.18. Se observa en la primera un comportamiento similar con resultados tomados de la ref.[2]. Primero se tiene una evaporación casi instantánea de la humedad (w) y una rapidez de combustión muy baja mientras las partículas se mueven cercanas a la pared norte. La rapidez de desvolatilización, que se visualiza mediante la curva de carbón sin reaccionar (c), se incrementa gradualmente haciéndose sumamente alta a partir de $t \approx 0,15$[s]. Conforme a esto, la fracción de coque (h) aumenta, aunque a una razón más moderada debido a su destrucción por combustión heterogénea.

Como se ve en la fig. 8.18a, para las partículas de diferentes tamaños las curvas de desvolatilización son coincidentes, dada la similitud de sus trayectorias, con un tiempo total de desvolatilización de aproximadamente 0,187[s]. Este tiempo es elevado en comparación con los medidos generalmente (de hasta[23] 0,1[s]), debido probablemente a haber asignado a las partículas la misma temperatura del gas (la evolución de la temperatura de las partículas se muestra en la fig 8.19a), lo que produce la baja rapidez inicial de desvolatilización (se han medido[23] temperaturas de partículas hasta 300 [K] superiores a la del gas). Además el modelo clásico de pirólisis adoptado supone

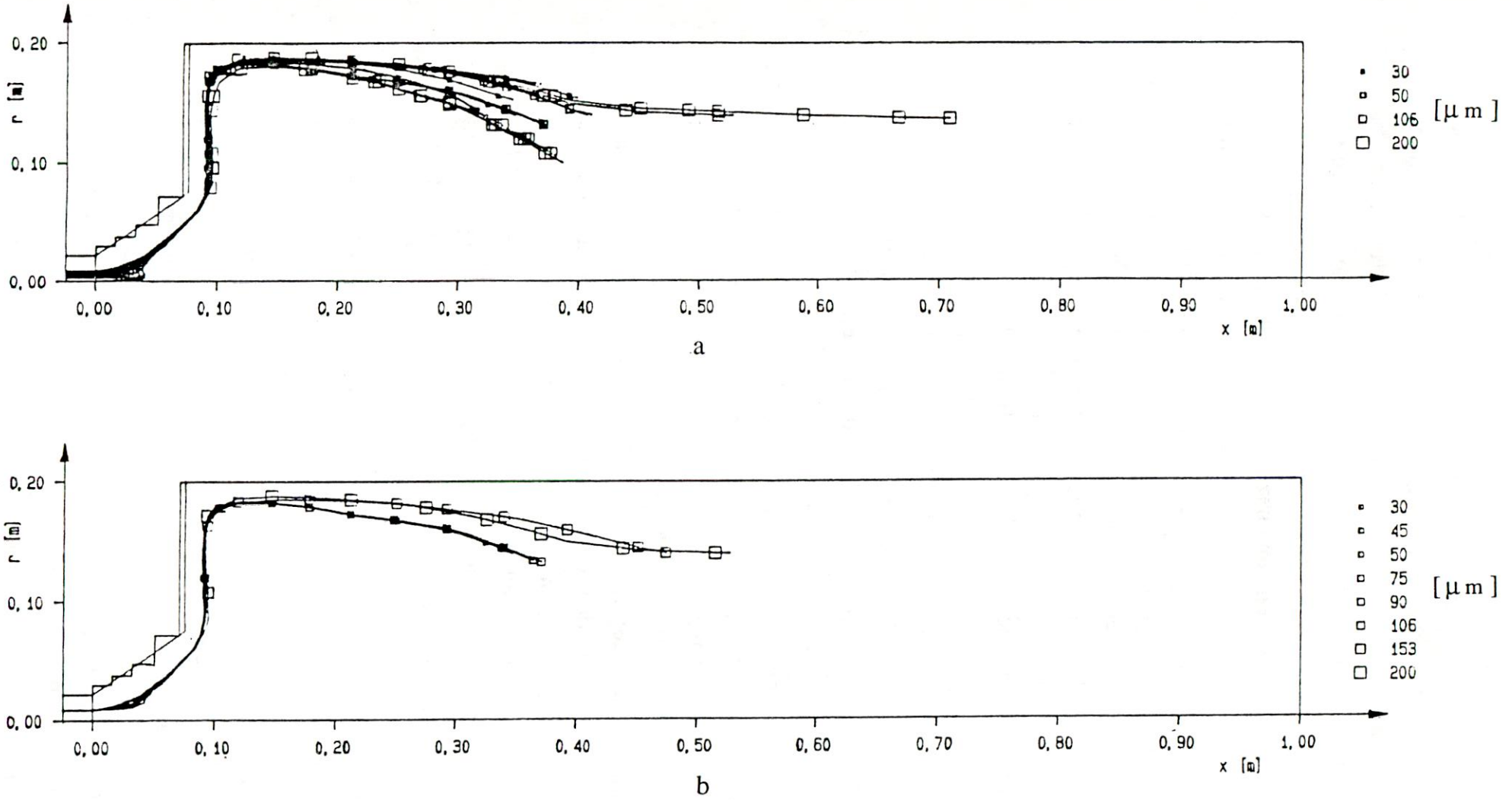
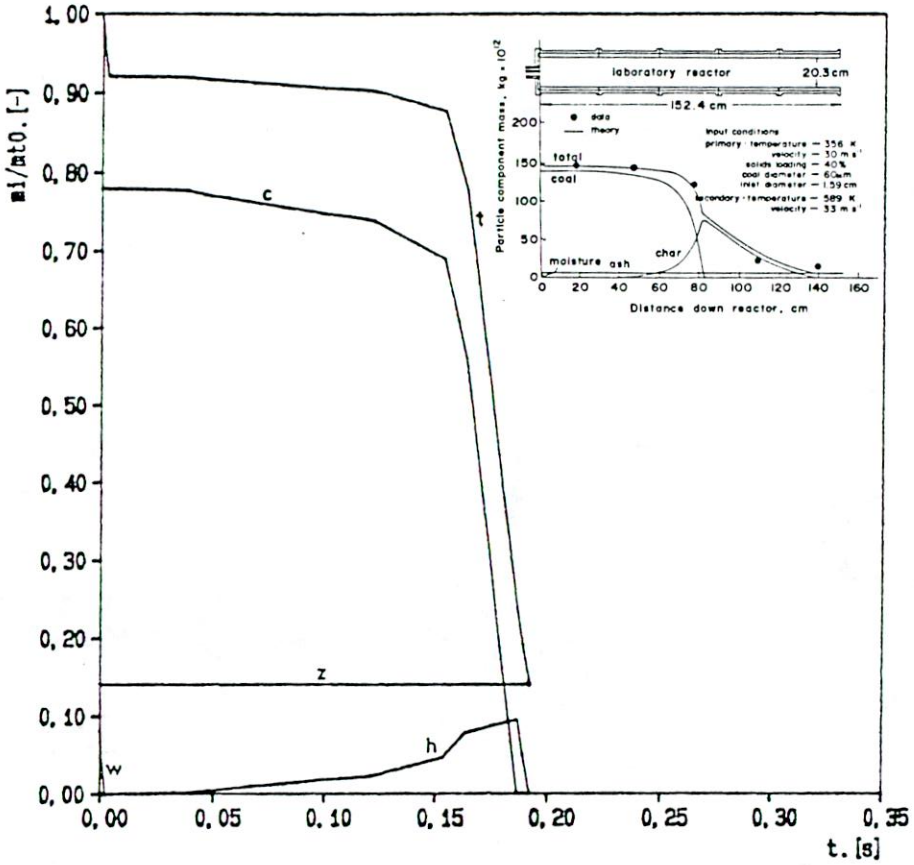
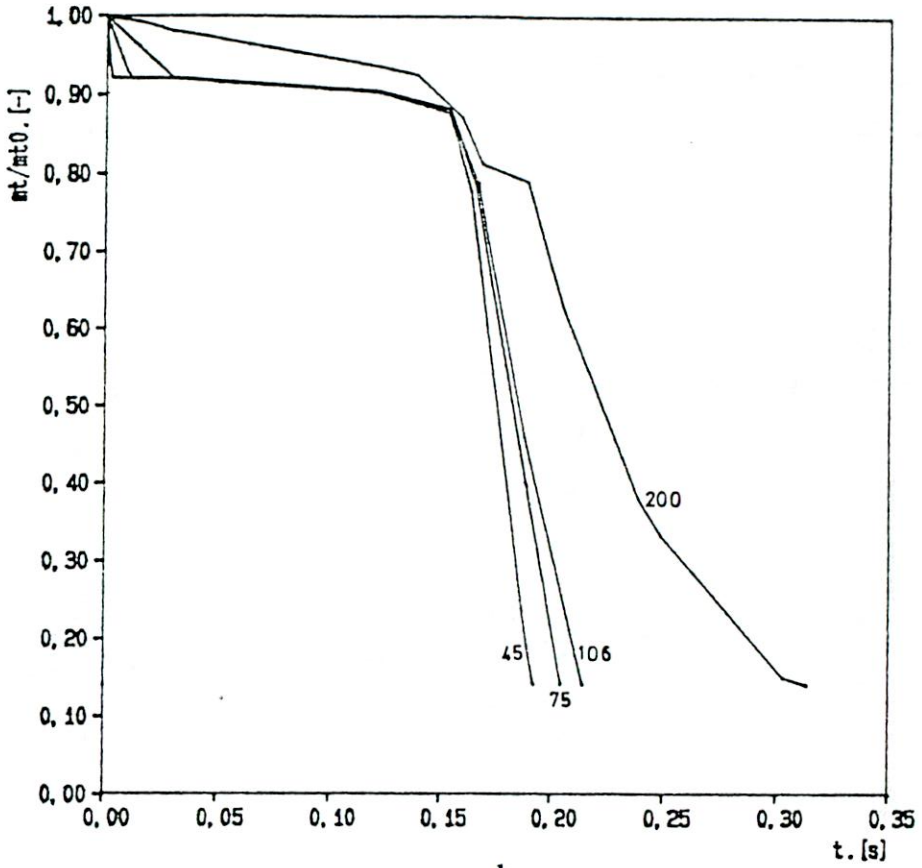


Fig 8.16 Trayectorias de las partículas.
a Para todas las compuertas de entrada, n_p = 1, 2, 3, 4, 5.
b Para la compuerta n_p =5.

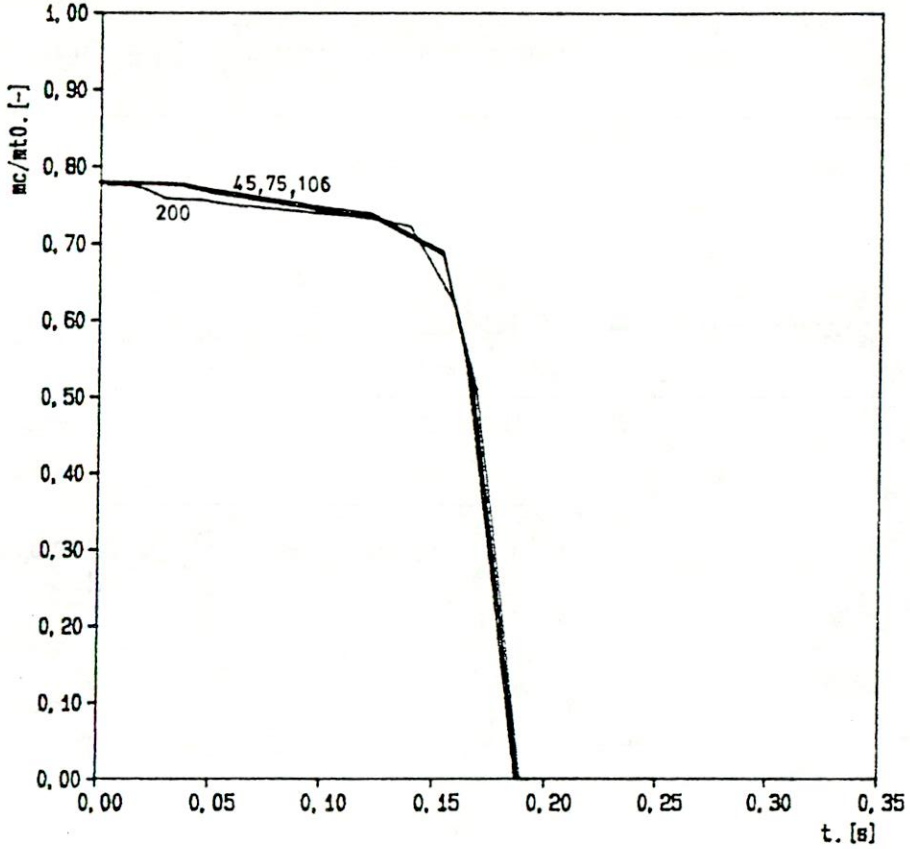


a

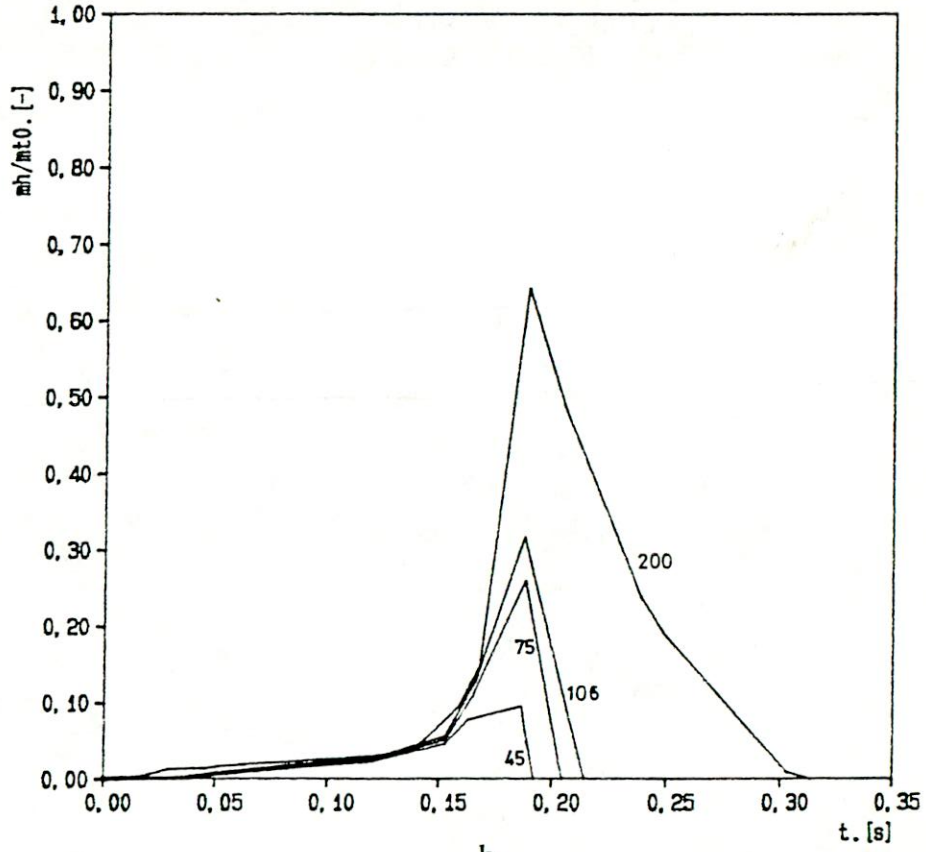


b

Fig. 8.17 Fracciones másicas respecto a la masa inicial:
a para las partículas con d_{po} = 45 [μm], n_p = 5.
b para n_p =5 y los diámetros que se indican, [μm]

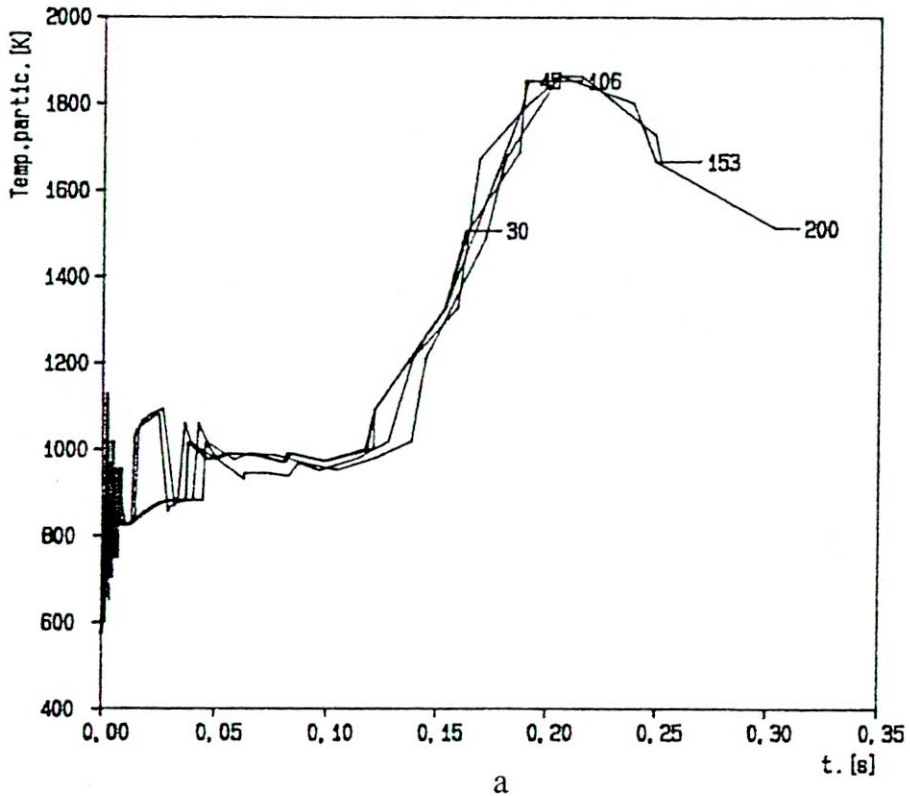


a

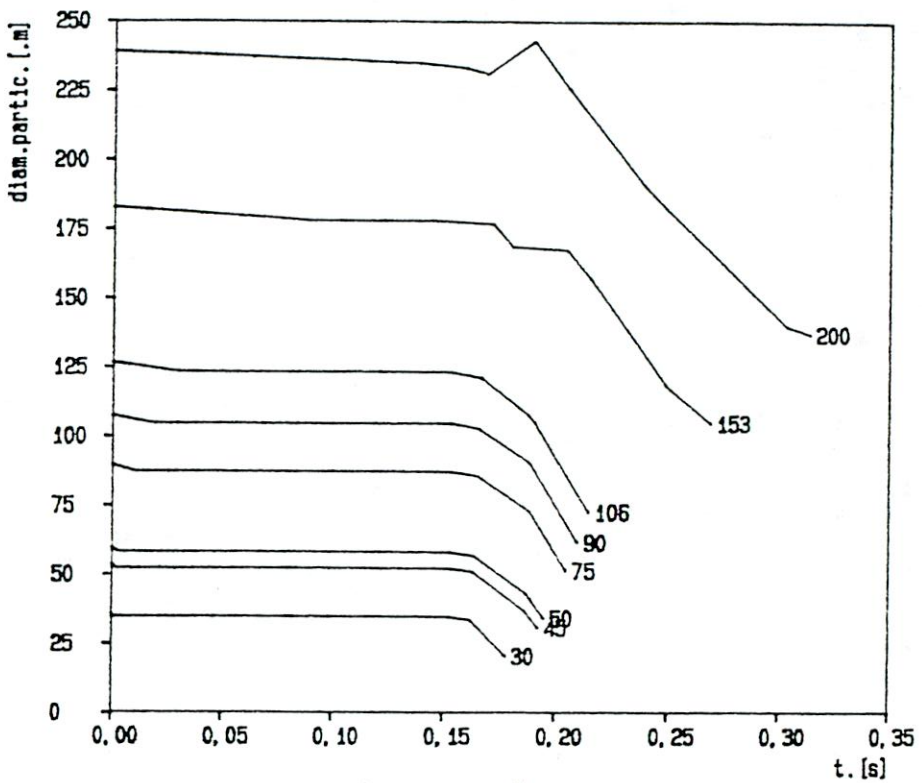


b

Fig. 8.18 Fracciones másicas respecto a la masa inicial para n_p =5 y los diámetros que se indican, [μm]
a carbón sin reaccionar
b coque



a



b

Fig. 8.19 Variación temporal para n_p =5 y los diámetros que se indican, [μm]:
a temperatura de las partículas.
b diámetro de las partículas.

MODELACION DE LA COMBUSTION
DE CARBON PULVERIZADO
USM-1989

una ignición homogénea del carbón: liberación e ignición de los volátiles dejando una partícula de coque que se quema subsecuentemente. Sin embargo, hay evidencias recientes de que la ignición heterogénea es de importancia y puede, sobre todo para las partículas de menor tamaño, llegar a ser predominante[23]. Esto contribuye también a que la rapidez total de combustión inicial quede subestimada.

En la fig. 8.18b se advierte que la fracción másica de coque alcanza valores más altos para tamaños mayores, indicando que a menor tamaño de partícula mayor es la importancia relativa de la combustión heterogénea que compite con la formación de coque por desvolatilización.

Por último, en la fig. 8.19b se muestra la variación del diámetro de las partículas. Inicialmente los diámetros son mayores que los asignados debido a las consideraciones de esfericidad e hinchamiento. Este último efecto queda claramente de manifiesto para las partículas de d_{po}=200[μm]. Los diámetros finales quedan determinados por el contenido de ceniza.

9. CONCLUSIONES

Los resultados y el comportamiento del programa desarrollado se pueden considerar, en general, satisfactorios. Las posibilidades de cálculo del anterior código COMBUS han quedado ampliadas a la determinación de los campos térmico y radiativo, completándose así la modelación de los fenómenos principales de la combustión de carbón pulverizado.

El área que más requiere mejorarse es el modelo de combustión homogénea, principalmente en lo que concierne a ampliar el mecanismo de reacción de H_2 e incluir el de CH_4. Para futuros trabajos en este tema se recomienda que esto se lleve a cabo implementando una subrutina de equilibrio químico, a fin de obtener primero una solución de equilibrio que se use luego como estimación inicial para el estado cinético estacionario. Una solución de equilibrio constituye una muy buena estimación inicial para TERMO, con lo cual se podría suprimir el empleo de la subrutina GASES, que es la que impone, por su inestabilidad numérica, la necesidad de un mecanismo de combustión muy simplificado. Tal programa de equilibrio químico debiera además desarrollarse según el esquema de Gordon-Mcbride para minimización de la función de Gibbs, el cual hace uso de subrutinas ya incorporadas en el código.

Al contar con la resolución del estado de equilibrio sería posible también la incorporación del modelo $\overline{f}$-g de combustión turbulenta, cuyas ecuaciones de transporte se pueden resolver con los métodos disponibles en el programa. Con esto se podrá avanzar notablemente en la modelación de la micromezcla y el control difusional de la combustión, hasta ahora omitido.

Para la fase sólida el principal aspecto pendiente es la obtención de la temperatura de las partículas, lo que habrá de efectuarse con métodos apropiados a la naturaleza "stiff" de la ecuación diferencial que la gobierna; así se podrá aprovechar cabalmente la información que se obtiene al resolver el campo de radiación, pues la acción de éste sobre las partículas es mucho más considerable que la que tiene sobre el gas. Por otro lado, la descripción precisa de la evaporación de la humedad de las partículas no parece tener gran influencia sobre los resultados, aunque sería deseable considerarla, a medida que se tenga información sobre ello, para completitud de la modelación.

La fragmentación de las partículas para formar cenizas volantes aparece también como modelable a un nivel simple, puesto

que sus trayectorias pueden seguirse con la misma subrutina PSIC , y el número de fragmentos puede basarse, en principio, en información estadística al respecto. Las principales limitaciones en este sentido serían la capacidad de memoria y el tiempo de proceso requerido, pero se podría cuantificar la influencia de las cenizas sobre el campo radiativo, cuyo efecto, en el último tiempo, se ha visto que es mayor que el que anteriormente se había considerado. Mucho más deseable sería, no obstante, incluir el efecto radiativo del hollín. El poder contar con un modelo para su formación parece ser poco factible en el corto plazo. Su inclusión en la modelación, por lo tanto, deberá basarse necesariamente en información experimental sobre valores típicos de concentración para las condiciones que se modelen.

En cuanto a la formación de especies polutantes, se concluye que sólo para la formación de NO se cuenta, por el momento, con un mecanismo aceptable aunque no del todo esclarecido; para el SO_2 existe información suficiente sobre el mecanismo de reacción pero no sobre la liberación de vólatiles sulfurados por parte del carbón. Para el caso del NO, tomando el HCN como principal especie nitrogenada emitida en la pirólisis del carbón, es posible asociar el mecanismo de reacción con el modelo de desvolatilización de las partículas, si bien la complejidad de este mecanismo hace improbable que pueda incluirse en forma detallada, de modo que deberá simplificarse convenientemente y tal vez acoplarlo sólo en forma parcial.

Otra posibilidad, más factible es determinar, en base a relaciones empíricas sobre desvolatilización del nitrógeno del carbón, principal fuente de NO, emisiones totales a la salida de la cámara de combustión, renunciando a obtener la distribución de la concentración en el interior de la misma.

El tiempo de computación que el programa requiere es elevado, pero puede constituir una alternativa a ensayos experimentales, sobre todo una vez superadas las imprecisiones observadas, principalmente por el gran número de variables determinadas y la resolución con la que se obtienen. De este modo, el código puede emplearse para estudiar la influencia de diferentes parámetros sobre el fenómeno completo. En tal caso, por ser necesarias múltiples ejecuciones del programa, es posible utilizar los resultados de una como estimaciones iniciales para la siguiente, reduciéndose así el tiempo de computación por cada una. Los resultados de dicho estudio pueden ser muy útiles para el diseño de quemadores de carbón pulverizado.

La estructuración del código en diferentes módulos, cada uno encargado de tratar un tópico en particular otorga gran flexibilidad para otras aplicaciones, por la posibilidad de suprimir la resolución de determinadas variables cambiando simplemente el valor de una variable lógica. Así, son posibles por ejemplo, la modelación de quemadores de combustibles gaseosos, desacoplando la subrutina de partículas; la obtención de campos radiativos a partir de distribuciones de temperatura conocidas, etc.

En relación a esto último hay que destacar la rapidez de convergencia del método de 4 flujos y, ya su extensión a tres dimensiones es directa mediante el método de 6 flujos y la definición como tercera variable independiente de la semisuma de los flujos en la tercera dirección, las subrutinas desarrolladas en la modelación de la radiación podrían utilizarse en la elaboración de un programa más general para tratar problemas de transferencia radiativa tridimensional en medios absorventes-dispersantes. Dada la simetría formal de las ecuaciones en un modelo de este tipo, la estabilidad numérica observada no debiera resultar afectada al ampliarse a tres dimensiones.

NOMENCLATURA

A : área [m^2] ; factor preexponencial de constante cinética k

a : coeficiente neto de transporte [kg/s] ; parámetro de tamaño

B_P : constante de tiempo de la celda [kg/s m^3]

b : fracción de dispersión hacia atrás

C : coeficiente de transporte convectivo [kg/s]

C_1, C_2, C_3 : constantes de atenuación, dispersión en método de 4 flujos [1/m]

C_4 : constante de emisión en método de 4 flujos [W/m^3]

Cp : calor específico [J/kg K] , [J/kmol K]

D : coeficiente de transporte difusivo [kg/s] ; difusividad binaria [m^2/s]

d : diámetro [m]

E : energía de activación [J/kmol]

e : espesor de pared [m]

$\mathbf{F}$: fuerza [N]

F : flujo de radiación [W/m^2]

Fx : flujo medio de radiación axial [W/m^2]

Fr : flujo medio de radiación radial [W/m^2]

f : fracción másica de combustible en la mezcla ; fracción de dispersión hacia adelante

f_c : fuerza de cuerpo [N/m^3]

$f_c(k)$: fracción másica de partículas que ingresan por la k-ésima compuerta

$f_d(l)$: fracción másica de partículas de la l-ésima clase de tamaño

f_ϕ : funcional de conservación de ϕ

G : producción de energía cinética turbulenta [J/s m^3]

g : energía libre [J/kmol] ; varianza de fracción másica f ; aceleración de gravedad [m/s^2]

H : flujo total de entalpía [W/m^3]

h : entalpía específica [J/kg], [J/kmol] ; coeficiente de transferencia de calor por convección [W/m^2 K]

I : intensidad de radiación [W/m^2 srad]

i : energía interna [J/kg]

$\mathbf{J}$: matriz jacobiana

K : constante de equilibrio químico ; coeficiente de atenuación, absorción o dispersión de radiación [1/m]

k : energía cinética turbulenta [J/kg] ; conductividad térmica [W/mK] ; constante cinética de reacción [$m^{3(n-1)}/kmol^{n-1}$ s] (con n el orden total de la reacción)

L : longitud media del haz [m]

M : masa molecular [kg/kmol] ; número de Mach

m : masa [kg]

$\dot{m}$: flujo másico [kg/s]

N : exponente de temperatura en constante cinética k

N_{kl} : número de partículas en un VC sobre la trayectoria (k,l)

Nu : número de Nusselt

$P(f)$: función de densidad de probabilidad

$P(S,S'),P(\theta)$: función de fase para dispersión

Pe : número de Peclet

Pr : número de Prandtl

p : presión, presión parcial [Pa]

Q : flujo de calor para el VC [W/m^3] ; transferencia de calor de la celda [J/kg] ; función auxiliar del método gradiente; factor de eficiencia de absorción o dispresión

Qx : flujo neto de radiación axial [W/m^2]

Qr : flujo neto de radiación radial [W/m^2]

q : flujo de calor [W], [W/m^2]

$\mathbf{q}_R$: vector de flujo neto radiativo [W/m^2]

R : constante universal de los gases [J/kmol K]

R_w : resistencia térmica de pared [K/W]

Re : número de Reynolds

r : coordenada radial [m] ; rapidez de reacción [$kmol/m^3s$], [kg/s]

$\mathbf{r}$: vector posición [m]

S_V : razón de dilatación de la partícula [1/s]

S^ϕ : término fuente de la variable ϕ

Sc : número de Schmidt

Sp^ϕ : pendiente de la linealización de S^ϕ

Su^ϕ : constante de la linalización de S^ϕ

s : entropía [J/kmol K] ; fracción de dispersión hacia los lados

T : temperatura [K]

t : tiempo [s]

u : componente axial de la velocidad [m/s]

V : volumen [m^3] ; volátil ; magnitud de la velocidad tangencial total sobre la pared [m/s]

VC : volumen de control

v : componente radial de la velocidad [m/s]

$\dot{W}$: potencia mecánica [W]

w : componente tangencial de la velocidad [m/s] ; velocidad de los volátiles relativa al centro de masa de las partículas [m/s]

X : índice de contacto

X_s : área total de dispersión [m^2]

x : coordenada axial [m] ; fracción másica de un componente en la mezcla

α : coeficiente estequiométrico ; fracción másica del carbón transformada en volátil

β : esfericidad ; coeficiente de expansión volumétrico [1/K]

Γ : coeficiente de difusión generalizado

δ_{ik} : delta de Kronecker

ε : disipación de energía cinética turbulenta [J/kg s] ; emisividad ; límite de precisión numérica.

η : coeficiente de relajación

θ : coordenada tangencial [rad] ; fracción de vacío

λ : longitud de onda [m]

μ : viscosidad dinámica [kg/m s]

ν : viscosidad cinemática [m^2/s]

ρ : densidad [kg/m^3] ; reflectividad

σ : número de Pradtll efectivo ; número molar [kmol/kg] ; constante de Stefan-Boltzmann [$W/m^2\ K^4$}

τ : tiempo característico de respuesta [s]

τ : tensor de esfuerzo [N/m^2]

τ_w : esfuerzo de corte en la pared [N/m^2]

ϕ : fracción másico de componente de volátil ; variable generalizada

Ω : ángulo sólido [srad]

Subíndices

a : absorción
b : reacción reversa, cuerpo negro
C : creación
c : carbón ; convección
D : difusión ; destrucción
E : nodo vecino este
EC : energía cinética
e : frontera este del VC ; equilibrio
eff : efectivo
f : reacción directa
g : gas
H : combustión heterogénea
h : coque
l : laminar ; local
m : mezcla
N : nodo vecino norte
n : frontera norte del VC
o : inicial ; flujo incompresible ; refrigerante
P : nodo central
p : partícula
R : radiación
r : en dirección radial ; refractario
S : nodo vecino sur
s : frontera sur del VC ; dispersión ; superficie de control
t : turbulento ; transversal ; atenuación
V : desvolatilización ; volátil
W : nodo vecino oeste ; humedad (agua)
w : frontera oeste del VC ; evaluado sobre la pared
x : en dirección axial
θ : en dirección tangencial
λ : dependencia espectral
Φ : disipación viscosa

Superídices

m : másico
(n) : n-ésima iteración
o : según estado de referencia estándar
T : transpuesto
' : en base al volumen de mezcla gas-partículas ; como reactante ; fluctuación turbulenta
" : como producto de reacción
¯ : promedio
* : promedio sobre los nodos vecinos (en funcionales)
^ : estado de equilibrio químico ; vector unitario

REFERENCIAS

[1] R. Bird , W. Stewart , E. Lighfoot
" Transport Phenomena ". John Wiley & Sons, New York (1960)

[2] L. Smoot , D. Pratt
" Pulverized - Coal Combustion and Gasification ". Plenum Press, New York (1979)

[3] C. Liu , C. Barkelew
" Numerical Analysis of Jet-Stirred Reactors with Turbulent Flows and Homogeneous Reactions ". AIChE Journal, Vol.32 , Nº11 (1986)

[4] B. Pai , S. Michelfelder , D. Spalding
" Prediction of Furnace Heat Transfer with a Three-Dimensional Mathematical Model ". Int. J. Heat and Mass Transfer , Vol.21 , pp.571- 580 (1978)

[5] D. Lilley , D. Rhode
" A Computer Code for Swirling Turbulent Axisymmetric Recirculating Flows in Practical Isothermal Combustor Geometries ". NASA Contractor Report 3442 (1982)

[6] J. Holman
" Heat Transfer ". McGraw-Hill, New York (1981)

[7] C. Meneveau
" Flujos Turbulentos de Suspensión Sólido-Gaseosa ". Memoria Ing. Civil Mecánico, UTFSM (1985)

[8] D. Pratt
" PSR - A Computer Program for Calculation of Steady Flow, Homogeneous Combustion Reaction Kinetics ".
Washington State University , Bulletin 336, Pullman (1974)

[9] H. Osorio
" Combustión de Carbón Pulverizado - Modelación Numérica ". Memoria Ing. Civil Mecánico, UTFSM (1988)

[10] R. Siegel , J. Howell
" Thermal Radiation Heat Transfer ". McGraw-Hill, New York (1972)

[11] S. Boothroyd , A. Jones
" A Comparison of Radiative Characteristics for Fly Ash and Coal ". Int. J. Heat and Mass Transfer , Vol.29, Nº11, pp. 1649-1654 (1986)

[12] J. Felske , C. Tien
" Calculation of the Emissivity of Luminous Flames ". Combustion Science and Technology, Vol.7, pp.25-31 (1973)

[13] H. van de Hulst
" Light Scattering by Small Particles ". John Wiley & Sons, New York (1957)

[14] A. Gaydon , H. Wolfhard
" Flames - Their Structure, Radiation and Temperature ". Chapman-Hall, London (1979)

[15] W. Bartok , V. Engleman , R. Goldstein , E. del Valle
" Basic Kinetics Studies and Modelling of Nitrogen Oxide Formation in Combustion Processes ". Chem. Eng. Progress Symp. Series, Vol.68, Nº126 (1972)

[16] D. Pratt , P. Malte
" Formation of Thermal and Prompt NO_x in a Jet Stirred Combustor ". Chem. Eng. Progress Symp. Series, Vol.71, Nº148 (1975)

[17] P. Glarborg , J. Miller , R. Kee
" Kinetic Modeling and Sensitivity Analysis of Nitrogen Oxide Formation in Well-Stirred Reactors ". Combustion and Flame, Vol.65, Nº2 (1986)

[18] A. Sarofim , G. Williams , M. Modell , S. Slater
" Conversion of Fuel Nitrogen to Nitric Oxide in Premixed and Difussion Flames ". Chem. Eng. Progress Symp. Series, Vol.71, Nº148 (1975)

[19] M. Zachariah , O. Smith
" Experimental and Numerical Studies of Sulfur Chemistry in $H_2/O_2/SO_2$ Flames ". Combustion and Flame, Vol.69, Nº2 (1987)

[20] H. Calcote
" Mechanism of Soot Nucleation in Flames - A Critical Review ". Combustion and Flame, Vol.42, Nº3 (1981)

[21] M. McNallan , G. Yurek , J. Elliot
" The Formation of Inorganic Particulates by Homogeneous Nucleation in Gases Produced by the Combustion of Coal ". Combustion and Flame, Vol.42, Nº1 (1981)

[22] S. Patankar
" Numerical Heat Transfer and Fluid Flow ". McGraw-Hill, New York (1980)

[23] G. Morrison
" Understanding Pulverized Coal Combustion ". IEA Coal Research, London (1986)

[24] G. Castellan
" Fisicoquímica ". Fondo Educativo Interamericano, México (1976)

[25] C. Rosales
" Bases para la Inclusión de la Ecuación de Energía y Especies Polutantes en la Modelación de la Combustión de Carbón Pulverizado ". Investigación Aplicada II, Depto. de Mecánica, UTFSM (1988)

[26] L. Tapia
" Análisis Numérico ". Apuntes, Depto. de Matemática, UTFSM (1985)

[27] S. Patankar , D. Spalding
" A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows ". Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol.15, pp. 1787-1806 (1972)

[28] Z. Weng , D. Chen
" Numerical Method for Computation of Turbulent Flow Field of Two-Dimensional Hydrogen-Air Mixing Stream with Detailed Chemical Reaction Mechanism ". Int. J. Hydrogen Energy, Vol.13, Nº6, (1988)

[29] D. Pratt , J. Wormeck
" CREK. A Computer Program for Calculation of Combustion Reaction Equilibrium and Kinetics in Laminar or Turbulent Flow ". Washington State University,
Report WSU-ME-TEL-76-1, Pullman (1976)

[30] G. Jordan-Engeln , F. Reutter
" Formelsammlung zur Numerischen Mathematik mit Standard-FORTRAN-Programmen ". Bibliographisches Institut AG, Manheim (1981)

[31] J. Ortega , W. Rheinboldt
" Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables ". Academic Press, New York (1970)

[32] F. Scheid
" Numerical Analysis ". McGraw-Hill, New York (1968)

{33] J. Hinze
" Turbulence ". McGraw-Hill, New York (1959)

[34] A. Bacigalupo
" Solidificación en Estado Transiente en Flujo Turbulento ". Memoria Ing. Civil Mecánico, UTFSM (1987)

[35] P. Hutchinson , E. Khalil , J. Whitelaw
" Measurement and Calculation of Furnace-Flow Properties ". Journal of Energy, Vol.1, July-Aug. (1977).

ANEXO A: ANALISIS DE LA INFLUENCIA DE LAS FUERZAS DE FLOTACION

La fuerza de cuerpo gravitacional, por unidad de volumen, sobre el gas es

$$f_c=\rho g \qquad (A.1)$$

Para considerar la variación de la densidad con la temperatura se expande ρ en una serie de Taylor[1] en T, en torno a una temperatura de referencia, $\overline{T}$, que en este caso se toma como la temperatura media dentro del campo:

$$\rho = \rho\,|_{\overline{T}} + \frac{\partial\rho}{\partial T}|_{\overline{T}}(T-\overline{T}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\rho}{\partial T^2}|_{\overline{T}}(T-\overline{T})^2 + \cdots \qquad (A.2)$$

Se introduce ahora el coeficiente de expansión volumétrico del gas definido como

$$\beta = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_P \qquad (A.3)$$

Despreciando los términos de orden superior en (A.2) y empleando (A.3) se obtiene

$$\rho = \overline{\rho} - \overline{\rho}\,\overline{\beta}(T-\overline{T}) \qquad (A.4)$$

con $\overline{\rho}$ y $\overline{\beta}$ los valores de ρ y β evaluados a $\overline{T}$. Suponiendo un comportamiento del gas ideal, $\beta=1/T$, de modo que la fuerza de cuerpo resultante es

$$f_c = \overline{\rho}g - \overline{\rho}g\frac{T-\overline{T}}{\overline{T}} \qquad (A.5)$$

$\overline{\rho}g$ representa el efecto de la gravedad mientras que $\overline{\rho}g\,(T-\overline{T})/\overline{T}$ corresponde a la fuerza de flotación. Puesto que las variaciones de temperatura dentro del campo no son extremas, el factor $(T-\overline{T})/\overline{T}$ sólo toma valores moderados (en general <1). Por lo tanto el efecto de la flotación es del mismo orden de magnitud que el de la gravedad, y si éste es despreciable, el primero también lo es.

ANEXO B: METODOS DE NEWTON-RAPHSON Y GRADIENTE

B.1 Método de Newton-Raphson.

Como se dijo en el punto 5.4.3, dado el sistema de ecuaciones no lineales

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{B.1}$$

su solución se encuentra corrigiendo la estimación con la que se cuenta para $\mathbf{x}$ en la forma

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \Delta\mathbf{x}^{(n)} \tag{B.2}$$

de modo que la nueva estimación satisfaga la ecuación (B.1), es decir

$$f_i(\mathbf{x}^{(n+1)}) = f_i(\mathbf{x}^{(n)} + \Delta\mathbf{x}^{(n)}) = 0 \qquad ; i=1,...,NS+2 \tag{B.3}$$

Desarrollando cada funcional en una serie de Taylor, (B.3) se puede escribir como

$$f_i(\mathbf{x}^{(n)} + \Delta\mathbf{x}^{(n)}) = f_i(\mathbf{x}^{(n)}) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} \left[\sum_{k=1}^{NS+2} \Delta x_k{}^{(n)} \frac{\partial}{\partial x_k} \right]^p f_i(\mathbf{x}^{(n)}) = 0 \tag{B.4}$$

Considerando sólo términos de primer orden se obtiene

$$\sum_{k=1}^{NS+2} \frac{\partial f_i(\mathbf{x}^{(n)})}{\partial x_k} \Delta x_k{}^{(n)} = - f_i(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{B.5}$$

y al cambiar a la variable $\ln x_k$

$$\sum_{k=1}^{NS+2} \frac{\partial f_i}{\partial \ln x_k}(\mathbf{x}^{(n)}) \Delta \ln x_k{}^{(n)} = - f_i(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{B.6}$$

Las NS+2 ecuaciones del tipo (B.6) se pueden agrupar en la forma matricial

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \ln x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial \ln x_{NS+2}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{NS+2}}{\partial \ln x_1} & \cdots & \frac{\partial f_{NS+2}}{\partial \ln x_{NS+2}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta \ln x_1 \\ \vdots \\ \Delta \ln x_{NS+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_{NS+2} \end{bmatrix} \qquad (B.7)$$

que corresponde a la ecuación (5.45). Resolviendo (B.7) para los $\Delta \ln x_k$ se recalcula **x** mediante $x_k^{(n+1)} = x_k^{(n)} \exp(\eta\, \Delta \ln x_k^{(n)})$ según lo explicado en 5.4.3.

Por otro lado, cerca de la solución, η=1 y el factor de corrección es solamente $\exp(\Delta \ln x_k^{(n)})$. Esta exponencial se puede desarrollar en serie de potencias como:

$$\exp(\Delta \ln x_k^{(n)}) = 1 + \Delta \ln x_k^{(n)} + \frac{1}{2!}(\Delta \ln x_k^{(n)})^2 + \frac{1}{3!}(\Delta \ln x_k^{(n)})^3 + \cdots \qquad (B.8)$$

y con $\Delta \ln x_k^{(n)}$ suficientemente pequeño, los términos de segundo orden y superiores resultan despreciables, por lo que

$$\exp(\Delta \ln x_k^{(n)}) \approx 1 + \Delta \ln x_k^{(n)} \qquad (B.9)$$

Reemplazando (B.9) en la ecuación de corrección anterior se llega a

$$\Delta \ln x_k^{(n)} \approx \frac{\Delta x_k^{(n)}}{x_k^{(n)}} \qquad (B.10)$$

B.2 Método del gradiente

El método que aquí se explica es, en realidad, una variante particular de una clase general de "métodos de gradiente". La idea básica es construir a partir de los funcionales f_i, una función Q tal que cuando la ecuación (B.1) se cumpla, Q también sea nula. En este caso se define

$$Q(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{NS+2} f_i^2(\mathbf{x}) \qquad (B.11)$$

(otras posibilidades son $Q = \sum_i |f_i|$, $Q = \sum_{ij} a_{ij} f_i f_j$, etc.)

Por lo tanto el problema se transforma en resolver la ecuación

$$Q(\mathbf{x}) = 0 \qquad \text{(B.12)}$$

puesto que lógicamente, una solución de (B.12) lo es también de (B.1). Como $Q(\mathbf{x})$ es siempre positiva, la resolución de (B.13) se efectúa minimizando la función Q. En consecuencia, $\mathbf{x}^{(n)}$ es corregido por un vector que apunte en la dirección de $-\nabla Q$ (ya que Q decrece en dicha dirección). Así se tiene[31,32]

$$\Delta\mathbf{x}^{(n)} = -\lambda\, \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \qquad ; \lambda > 0 \qquad \text{(B.13)}$$

donde el escalar λ que pondera a $-\nabla Q$ debe escogerse de modo que

$$Q(\mathbf{x}^{(n+1)}) = Q(\mathbf{x}^{(n)} - \lambda\, \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)})) = 0 \qquad \text{(B.14)}$$

Por un desarrollo en serie de Taylor, truncado para términos de orden superior, se obtiene

$$Q(\mathbf{x}^{(n)} - \lambda\, \nabla Q) = Q(\mathbf{x}^{(n)}) + \sum_{k=1}^{NS+2} \frac{\partial Q}{\partial x_k}\left(-\lambda\, \frac{\partial Q}{\partial x_k}\right) = 0 \qquad \text{(B.15)}$$

de donde

$$Q(\mathbf{x}^{(n)}) - \lambda\, \|\nabla Q(\mathbf{x}^{(n)})\|^2 = 0 \qquad \text{(B.16)}$$

Despejando λ y reemplazándolo en (B.13) la regla de iteración (B.2) resulta

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} - \frac{Q(\mathbf{x}^{(n)})}{\| \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \|^2}\, \nabla Q(\mathbf{x}^{(n)}) \qquad \text{(B.17)}$$

ANEXO C: DETERMINACION DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE LOS FUNCIONALES TERMOQUIMICOS

Se obtienen aquí las derivadas $\frac{\partial f_i}{\partial \ln x_k}$ (i,k=1,...,NS+2) que componen la matriz **J**.

Sea $z = \ln x_k$, entonces

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln x_k} = \frac{\partial f_i}{\partial x_k}\frac{\partial x_k}{\partial z} \qquad (C.1)$$

pero de acuerdo al cambio de variable, $x_k = e^z$, por lo que $\frac{\partial x_k}{\partial z} = x_k$. Por lo tanto,

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln x_k} = x_k \frac{\partial f_i}{\partial x_k} \qquad (C.2)$$

C.1 Funcionales de especies

$$f_i = B_P^{\sigma}(\sigma_i - \sigma_i^*) + \sum_{j=1}^{J\,J}(\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'')(r_{fj} - r_{bj}) - {}_pS^{\sigma_i} \quad ; i=1,...,NS \qquad (C.3)$$

C.1.1 Derivación respecto a $\ln\sigma_k$

Derivando (C.3) término a término se tiene que:

$$\frac{\partial}{\partial \ln\sigma_k}[B_P^{\sigma}(\sigma_i - \sigma_i^*)] = \sigma_k B_P^{\sigma}\frac{\partial \sigma_i}{\partial \sigma_k} = \sigma_k B_P^{\sigma}\,\delta_{ik} \qquad (C.4)$$

siendo δ_{ik} el delta de Kronecker ($\delta_{ik}=1$ si i=k ; $\delta_{ik}=0$ si i≠k).

$$\frac{\partial}{\partial \ln\sigma_k}\left[\sum_{j=1}^{J\,J}(\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'')(r_{fj} - r_{bj})\right] = \sigma_k \sum_{j=1}^{J\,J}(\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'')\left(\frac{\partial r_{fj}}{\partial \sigma_k} - \frac{\partial r_{bj}}{\partial \sigma_k}\right) \qquad (C.5)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial \ln\sigma_k}\left({}_pS^{\sigma_i}\right) = 0 \qquad (C.6)$$

Se deducen ahora las derivadas de r_{fj} y r_{bj}:

$$r_{fj} = k_{fj}(\rho\sigma_m)^{\alpha_j}\prod_{n=1}^{NS}(\rho\sigma_n)^{\alpha_{nj}'} = k_{fj}(\rho\sigma_m)^{\alpha_j}\rho^{n_j'}\prod_{n=1}^{NS}(\sigma_n)^{\alpha_{nj}'} \qquad (C.7)$$

con $$n_j' = \sum_{n=1}^{N\,S} \alpha_{nj}' \qquad (C.8)$$

Derivando (C.7) se obtiene

$$\frac{\partial r_{fi}}{\partial \sigma_k} = k_{fj} (\rho \sigma_m)^{\alpha_j} \rho^{n_j'} \frac{\alpha_{ki}'}{\sigma_k} \prod_{n=1}^{NS} (\sigma_n)^{\alpha_{nj}'} = \frac{\alpha_{ki}'}{\sigma_k} r_{fj} \qquad (C.9)$$

En forma análoga se llega a

$$\frac{\partial r_{bi}}{\partial \sigma_k} = \frac{\alpha_{ki}''}{\sigma_k} r_{bj} \qquad (C.10)$$

Substituyendo (C.9) y (C.10) en (C.5) y sumando (C.4), (C.5) y (C.6) se obtiene

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln \sigma_k} = B_P^{\sigma} \sigma_k \delta_{ik} + \sum_{j=1}^{J\,J} (\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'')(\alpha_{kj}' r_{fj} - \alpha_{kj}'' r_{bj}) \; ; \; i,k=1,...,NS \qquad (C.11)$$

C.1.2 Derivación respecto a $\ln\sigma_m$

A partir de (C.3) es claro que

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln \sigma_m} = \sigma_m \sum_{j=1}^{J\,J} (\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'') \left(\frac{\partial r_{fi}}{\partial \sigma_m} - \frac{\partial r_{bi}}{\partial \sigma_m} \right) \qquad (C.12)$$

Se deriva (C.7) nuevamente, esta vez respecto a σ_m. Dado que

$$\rho = \frac{p}{RT\sigma_m} \qquad (C.13)$$

entonces $$\frac{\partial}{\partial \sigma_m} \left((\rho \sigma_m)^{\alpha_j} \right) = \frac{\partial}{\partial \sigma_m} \left((p/RT)^{\alpha_j} \right) = 0 \qquad (C.14)$$

Por consiguiente se tiene que

$$\frac{\partial r_{fi}}{\partial \sigma_m} = k_{fj} (\rho \sigma_m)^{\alpha_j} \; n_j' \; \rho^{n_j'-1} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma_m} \prod_{n=1}^{NS} (\sigma_n)^{\alpha_{nj}'} \qquad (C.15)$$

De la ecuación (C.13) se sigue que

$$\frac{\partial \rho}{\partial \sigma_m} = - \frac{p}{RT\sigma_m^2} = - \frac{\rho}{\sigma_m} \qquad (C.16)$$

Reemplazando este resultado en (C.16) se obtiene

$$\frac{\partial r_{fj}}{\partial \sigma_m} = - \frac{n_j'}{\sigma_m} r_{fj} \qquad (C.17)$$

y análogamente

$$\frac{\partial r_{bj}}{\partial \sigma_m} = - \frac{n_j''}{\sigma_m} r_{bj} \qquad (C.18)$$

El reemplazo de (C.17) y (C.18) en (C.12) da

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln \sigma_m} = \sum_{j=1}^{J} (\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'')(n_j'' r_{bj} - n_j' r_{fj}) \quad ; i = 1,...,NS \qquad (C.19)$$

C.1.3 Derivación respecto a lnT

En este caso se tiene

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln T} = T \sum_{j=1}^{J} (\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'') \left(\frac{\partial r_{fj}}{\partial T} - \frac{\partial r_{bj}}{\partial T} \right) \qquad (C.20)$$

Derivando (C.7) respecto a T:

$$\frac{\partial r_{fj}}{\partial T} = \frac{\partial k_{fj}}{\partial T} (\rho \sigma_m)^{\alpha_j} \rho^{n_j'} \prod_{n=1}^{NS} (\sigma_n)^{\alpha_{nj}'}$$

$$+ k_{fj} (\sigma_m)^{\alpha_j} (\alpha_j + n_j') \rho^{\alpha_j + n_j' - 1} \frac{\partial \rho}{\partial T} \prod_{n=1}^{NS} (\sigma_n)^{\alpha_{nj}'} \qquad (C.21)$$

La constante cinética está dada por la ecuación de Arrhenius:

$$k_{fj} = A_{fj} T^{N_{fj}} \exp\left(- \frac{E_{fj}}{RT} \right) \qquad (C.22)$$

cuya derivada resulta

$$\frac{\partial k_{fi}}{\partial T} = A_{fj}\, N_{fj}\, T^{N_{fj}-1} \exp\left(-\frac{E_{fi}}{RT}\right) + A_{fj}\, T^{N_{fj}} \exp\left(-\frac{E_{fi}}{RT}\right)\left(\frac{E_{fi}}{RT^2}\right)$$

$$= \left(\frac{N_{fi}}{T} + \frac{E_{fi}}{RT^2}\right) k_{fj} \qquad \text{(C.23)}$$

Empleando la ecuación (C.14)

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} = -\frac{p}{RT^2 \sigma_m} = -\frac{\rho}{T} \qquad \text{(C.24)}$$

y reemplazando (C.23) y (C.24) en (C.21) se obtiene

$$\frac{\partial r_{fi}}{\partial T} = \frac{r_{fi}}{T}\left(N_{fj} + \frac{E_{fj}}{RT} - \alpha_j - n_j'\right) \qquad \text{(C.25)}$$

Del mismo modo, para r_{bj} se tiene

$$\frac{\partial r_{bi}}{\partial T} = \frac{\partial k_{bi}}{\partial T}(\rho\sigma_m)^{\alpha_j} \rho^{n_j''} \prod_{n=1}^{NS} (\sigma_n)^{\alpha_{nj}''}$$

$$+ k_{bj} (\sigma_m)^{\alpha_j} (\alpha_j + n_j'') \rho^{\alpha_j + n_j'' - 1} \frac{\partial \rho}{\partial T} \prod_{n=1}^{NS} (\sigma_n)^{\alpha_{nj}''} \qquad \text{(C.26)}$$

Como se explica en el punto 3.3, la constante cinética reversa se determina mediante la constante de equilibrio para la reacción. Por lo tanto, utilizando la ecuación (3.20) para K_{cj} :

$$k_{bj} = A_{fj} \left(\frac{R}{p_o}\right)^{n_j'' - n_j'} T^{N_{fj} + n_j'' - n_j''} \exp\left[-\frac{E_{fi}}{RT} - \sum_{n=1}^{NS} (\alpha_{nj}' - \alpha_{nj}'') \frac{g_n^o}{RT}\right]$$

(C.27)

Las propiedades del gas se encuentran regresionadas como sigue:

$$\frac{h}{RT} = Z_1 + \frac{1}{2} Z_2 T + \frac{1}{3} Z_3 T^2 + \frac{1}{4} Z_4 T^3 + \frac{1}{5} Z_5 T^4 + \frac{Z_6}{T} \qquad \text{(C.28)}$$

$$\frac{s}{R} = Z_1 \ln T + Z_2 T + \frac{1}{2} Z_3 T^2 + \frac{1}{3} Z_4 T^3 + \frac{1}{4} Z_5 T^4 + Z_7 \qquad \text{(C.29)}$$

Luego, la energía libre adimensional está dada por

$$\frac{g}{RT} = Z_1(1 - \ln T) - \frac{1}{2} Z_2 T - \frac{1}{6} Z_3 T^2 - \frac{1}{12} Z_4 T^3 - \frac{1}{20} Z_5 T^4 + \frac{Z_6}{T} - Z_7$$

(C.30)

y, por lo tanto

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{g}{RT}\right) = -\frac{Z_1}{T} - \frac{1}{2}Z_2 - \frac{1}{3}Z_3 T - \frac{1}{4}Z_4 T^2 - \frac{1}{5}Z_5 T^3 - \frac{Z_6}{T^2} = -\frac{h}{RT^2} \tag{C.31}$$

Derivando (C.27) respecto a T y empleando (C.31) se llega a

$$\frac{\partial k_{bi}}{\partial T} = \frac{k_{bi}}{T}\left[N_{fj} + n_j'' - n_j' + \frac{E_{fi}}{RT} + \sum_{n=1}^{NS}(\alpha_{nj}' - \alpha_{nj}'')\frac{h_n}{RT}\right] \tag{C.32}$$

Reemplazando esta ecuación junto con (C.24) en (C.26) y factorizando se llega a:

$$\frac{\partial r_{bi}}{\partial T} = \frac{r_{bi}}{T}\left[N_{fj} - n_j' + \frac{E_{fi}}{RT} + \sum_{n=1}^{NS}(\alpha_{nj}' - \alpha_{nj}'')\frac{h_n}{RT} - \alpha_j\right] \tag{C.33}$$

Finalmente, por la substitución de (C.25) y (C.33) en (C.20) se obtiene

$$\frac{\partial f_i}{\partial \ln T} = \sum_{j=1}^{JJ}(\alpha_{ij}' - \alpha_{ij}'')\left[\left(N_{fj} + \frac{E_{fi}}{RT} - \alpha_j - n_j'\right)(r_{fj} - r_{bj}) - r_{bj}\sum_{n=1}^{NS}(\alpha_{nj}' - \alpha_{nj}'')\frac{h_n}{RT}\right] \tag{C.34}$$

C.2 Funcional de σ_m

$$f_m = \sum_{n=1}^{NS}\sigma_n - \sigma_m \tag{C.35}$$

Dada la sencillez de este funcional, sus derivadas son inmediatas:

$$\frac{\partial f_m}{\partial \ln \sigma_k} = \sigma_k \sum_{n=1}^{NS}\frac{\partial \sigma_n}{\partial \sigma_k} = \sigma_k \tag{C.36}$$

$$\frac{\partial f_m}{\partial \ln \sigma_m} = \sigma_m\,(-1) = -\sigma_m \tag{C.37}$$

$$\frac{\partial f_m}{\partial \ln T} = 0 \qquad (C.38)$$

C.3 Funcional de energía

$$f_T = \frac{1}{RT}\left(\sum_{n=1}^{NS} \sigma_n h_n - h^* + Q\right) \qquad (C.39)$$

Directamente se tiene que:

$$\frac{\partial f_T}{\partial \ln \sigma_k} = \frac{\sigma_k}{RT} \sum_{n=1}^{NS} \frac{\partial \sigma_n}{\partial \sigma_k} h_n = \frac{\sigma_k h_k}{RT} \qquad (C.40)$$

$$\frac{\partial f_T}{\partial \ln \sigma_m} = 0 \qquad (C.41)$$

$$\frac{\partial f_T}{\partial \ln T} = T\left[\frac{1}{RT}\left(\sum_{n=1}^{NS} \sigma_n \frac{\partial h_n}{\partial T} + \frac{\partial Q}{\partial T}\right) - \frac{1}{RT^2}\left(\sum_{n=1}^{NS} \sigma_n h_n - h^* + Q\right)\right]$$

$$= \frac{1}{R}\left(\sum_{n=1}^{NS} \sigma_n Cp_n + \frac{\partial Q}{\partial T}\right) - f_T \qquad (C.42)$$

Algunas referencias consultadas [2,29] no incluyen el término $- f_T$ en esta derivada. Este término aparece por la introducción del factor 1/RT, lo que corresponde sólo una definición conveniente del funcional, como se explica en 5.4.2, y no tiene relación con el comportamiento físico del mismo (en otras palabras, f_T puede definirse sin este factor, el que se incorpora posteriormente a f_T y sus derivadas). En este caso se prefirió incluir $-f_T$ en la derivada, para que ésta sea absolutamente consecuente con el comportamiento numérico del funcional. Ya que al converger a la solución f_T tiende a cero, las derivadas en ambos enfoques convergen al mismo valor.

En cuanto a Q, según (5.37) su derivada es

$$\frac{\partial Q}{\partial T} = - \frac{1}{B_P^h} \frac{\partial S^h}{\partial T} \qquad (C.43)$$

De las fuentes que componen S^h, ni la de energía cinética ni la de disipación viscosa dependen explícitamente de T, por lo que sus derivadas son nulas. No es así, en cambio, para la fuente radiativa y la asociada a las partículas, pero ya que éstas sólo se calculan en sus respectivas subrutinas y permanecen constantes durante la resolución de las ecuaciones termoquímicas, es necesario considerar nulas sus derivadas, para que $\frac{\partial f_T}{\partial \ln T}$ refleje fielmente las variaciones en el valor numérico de f_T. Por lo tanto se toma

$$\frac{\partial S^h}{\partial T} = 0 \qquad \text{(C.44)}$$

excepto en los nodos adyacentes a las paredes, donde la fuente adicional por flujo de calor hacia la pared se recalcula en cada iteración. Para esos nodos se tiene de (5.86), (5.87) y (C.24):

$$\frac{\partial S^h}{\partial T} = - \frac{A_t}{\Delta V} \frac{(\tau_w \rho)^{1/2} Cp}{T^+} \left(1 - \frac{T - T_w}{2T} \right) \qquad \text{(C.45)}$$

ANEXO D : FUNCIONES DE PARED

El perfil de velocidad del flujo en la capa límite puede aproximarse por el llamado "perfil universal de velocidades":[5,6]

$$V^+ = Y^+ \quad , 0 < Y^+ < 11{,}63 \qquad \text{(D.1a)}$$

$$V^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(EY^+) \quad , Y^+ \geq 11{,}63 \qquad \text{(D.1b)}$$

donde κ y E son constantes ($\kappa = 0{,}4187$; $E = 9{,}793$), V^+ es la velocidad adimensional e Y^+ es la distancia adimensional desde la pared, definidas como:

$$V^+ = \frac{V}{(\tau_w/\rho)^{1/2}} \qquad \text{(D.2)}$$

$$Y^+ = \frac{(\tau_w/\rho)^{1/2}}{\nu} y \qquad \text{(D.3)}$$

con V la magnitud de la velocidad tangencial total, τ_w el esfuerzo de corte total sobre la pared, y la distancia normal desde la pared , ν la viscosidad cinemática laminar del gas. En la ecuación (D.1a) se ha considerado que los puntos con $Y^+ < 11{,}63$ quedan dentro de la subcapa laminar, donde la viscosidad laminar es dominante, y el perfil de velocidad es lineal.

D.1 Perfil de temperatura adimensional.

A partir del perfil de velocidad adimensional es posible deducir uno de temperatura adimensional, en base a una supuesta analogía entre el transporte turbulento de momentum y el de energía.

El esfuerzo total consta de una parte laminar y otra turbulenta, que quedan consideradas al emplear la viscosidad efectiva:

$$\tau = \mu_{eff} \frac{\partial V}{\partial y} \qquad \text{(D.4)}$$

De igual forma, se postula un coeficiente de conducción térmica efectivo, de modo que el flujo de calor, por unidad de área, desde el gas hacia la pared sea

$$q = k_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \qquad (D.5)$$

e integrando se obtiene

$$T - T_w = \int_0^y \frac{q}{k_{eff}} dy \qquad (D.6)$$

Esta ecuación se puede adimensionalizar en la forma[33]

$$\frac{\mu_w Cp\ (T - T_w)}{q_w \delta} = \int_0^\gamma \frac{q}{q_w} \frac{\mu_w}{\mu_{eff}} Pr_{eff}\ d\gamma \qquad (D.7)$$

con $Pr_{eff} = Cp\ \mu_{eff} / k_{eff}$ (D.8)

y $\gamma = y/\delta$ (D.9)

siendo δ el espesor de la capa límite para la sección en cuestión. De (D.9), (D.4) y (D.2) se tiene

$$d\gamma = \frac{1}{\delta} \frac{\mu_{eff}}{\tau} (\tau_w/\rho)^{1/2}\ dV^+ \qquad (D.10)$$

Por lo tanto, (D.7) se puede reescribir como

$$\frac{\mu_w Cp\ (T - T_w)}{q_w \delta} = \int_0^{V^+} \frac{1}{\delta} \frac{\mu_w}{(\tau_w \rho)^{1/2}} \frac{q}{q_w} \frac{\tau_w}{\tau} Pr_{eff}\ dV^+ \qquad (D.11)$$

Puede lograrse similaridad entre distribuciones de temperatura y velocidad sólo si[33]

$$\frac{q}{q_w} \frac{\tau}{\tau_w} Pr_{eff} = \text{constante} \qquad (D.12)$$

Esta condición no se cumple en general, pero en algunos casos se da aproximadamente. El postulado inicial (hipótesis de Reynolds) supone que la analogía entre transporte de momentum y energía es completa, por lo que (D.12) debe

cumplirse. Otras teorías más elaboradas (por ej. la de Reichardt) conducen a expresiones demasiado complicadas para la integral en (D.11), que sólo pueden resolverse numéricamente. Por consiguiente, como primera aproximación , y puesto que ha dado resultados satisfactorios en otras aplicaciones[34], se emplea la hipótesis de Reynolds. Además, aún en la teoría de Reichardt, que no considera ninguna posible analogía entre transporte de momentum y energía, se supone que $q/q_w = \tau/\tau_w$. De manera que (D.11) se transforma en

$$T^+ = \frac{(\tau_w \rho)^{1/2}\, Cp\, (T - T_w)}{q_w} = Pr_{eff} \int_0^{V^+} dV^+ \qquad (D.13)$$

donde se ha definido la temperatura adimensional T^+. Luego, si $Y^+ > 11{,}63$ (y por lo tanto $V^+ > 11{,}63$) se tiene según (D.1):

$$T^+ = Pr_{eff}\left[\int_0^{11.63} dV^+ + \int_{11.63}^{V^+} dV^+ \right]$$

$$= Pr_{eff}\left[11{,}63 + \frac{1}{\kappa}\ln(Y^+) - \frac{1}{\kappa}\ln(11{,}63)\right] \qquad (D.14)$$

Si $Y^+ < 11{,}63$ entonces $T^+ = Pr_{eff}\, Y^+$ (D.15)

Para el valor de $Pr_{eff} = 0{,}885$ empleado en este trabajo, el perfil de temperatura adimensional resulta finalmente

$$T^+ = 0{,}885\, Y^+ \quad , 0 < Y^+ < 11{,}36 \qquad (D.16a)$$

$$T^+ = \frac{1}{0{,}4731}\ln(11{,}1998\, Y^+) \quad , \quad Y^+ \geq 11{,}63 \qquad (D.16b)$$

D.2 Evaluación de esfuerzos de corte

- Pared norte:

Para la pared norte $\tau_w = (\tau_{rx}^2 + \tau_{r\theta}^2)^{1/2}$ y $V = (u^2 + w^2)^{1/2}$. Designando por α el ángulo entre u y V (o sea, $\tan\alpha = w/u$) y ya que este ángulo es aproximadamente constante[5] cerca de la pared,

$$\tau_{rx} = \tau_w \cos\alpha = \tau_w \frac{u}{V} \qquad (D.17)$$

$$\tau_{r\theta} = \tau_w \operatorname{sen}\alpha = \tau_w \frac{w}{V} \qquad (D.18)$$

- Pared oeste:

Para esta pared se tiene $\tau_w = (\tau_{xr}^2 + \tau_{x\theta}^2)^{1/2}$ y $V = (v^2 + w^2)^{1/2}$. En forma análoga al caso anterior, $\tan\alpha = w/v$, por lo que

$$\tau_{xr} = \tau_w \cos\alpha = \tau_w \frac{v}{V} \qquad (D.19)$$

$$\tau_{x\theta} = \tau_w \operatorname{sen}\alpha = \tau_w \frac{w}{V} \qquad (D.20)$$

Para más información veánse ref. [5] , [25].

ANEXO E : ECUACION PARA LA TEMPERATURA DE PARED

- Pared norte:

Para la pared norte correspondiente al manto de la cámara cilíndrica (es decir, excluidos los tramos horizontales del escalonamiento del difusor) la situación completa modelada se muestra en la fig. E.1 . Después del refractario de espesor e y conductividad térmica k_r se halla la carcasa metálica y luego el fluido refrigerante (agua) a temperatura T_o, siendo h_o el coeficiente de convección externo (todos estos parámetros se fijan como condiciones de borde).

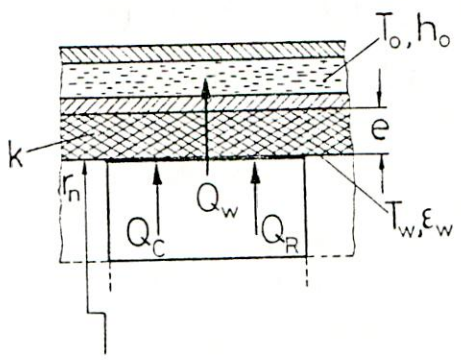


Fig. E.1 Pared norte

De acuerdo a lo señalado en 5.6 y 6.5.4 , los flujos netos de calor convectivo y radiativo hacia la pared son respectivamente

$$Q_c = \frac{1}{T^+}(\tau_w \rho)^{1/2} Cp\ (T - T_w)\ A_n \qquad (E.1)$$

$$Q_R = Qr_n\ A_n = \frac{2\varepsilon_w}{2 - \varepsilon_w}(Fr_P - \sigma T_w^4)\ A_n \qquad (E.2)$$

con A_n el área de la frontera norte de la celda. Poe su parte, el flujo de calor transferido al refrigerante se puede calcular como (suponiendo transferencia unidimensional):

$$Q_w = (T_w - T_o)/R_w \qquad (E.3)$$

con R_w la resistencia térmica para la pared cilíndrica ($\Delta\theta$ = 1[rad]) y la convección exterior:

$$R_w = \frac{\ln\left(\frac{r_n + e}{r_n}\right)}{k_r \Delta x_{e\,w}} + \frac{1}{h_o (r_n + e)\, \Delta x_{e\,w}} \qquad \text{(E.4)}$$

donde se ha despreciado la resistencia térmica de la carcasa. Es claro que $Q_w = Q_c + Q_R$, por lo que reemplazando las expresiones anteriores en esta ecuación y agrupando términos se llega a una ecuación para la temperatura interior de la pared:

$$pT_w^4 + qT_w = r \qquad \text{(E.5)}$$

con

$$p = 2\varepsilon_w\ \sigma A_n/(2 - \varepsilon_w) \qquad \text{(E.6)}$$

$$q = (\tau_w \rho)^{1/2}\ Cp A_n/\ T^+ + 1/R_w \qquad \text{(E.7)}$$

$$r = (\tau_w \rho)^{1/2}\ Cp A_n T/\ T^+ + T_o/R_w + 2\varepsilon_w\ A_n Fr_P/(2 - \varepsilon_w) \qquad \text{(E.8)}$$

- **Pared oeste:**

En la pared oeste no existe la refrigeración por agua sino únicamente la convección natural del aire exterior. Para simplificar se ha supuesto que esta pared está aislada, de modo que $Q_w = 0$. Para la convección y radiación se tiene:

$$Q_c = \frac{1}{T^+} (\tau_w \rho)^{1/2}\ Cp\ (T - T_w)\ A_w \qquad \text{(E.9)}$$

$$Q_R = -\,Qx_w\, A_w = \frac{2\varepsilon_w}{2 - \varepsilon_w} (Fx_P - \sigma T_w^4)\ A_w \qquad \text{(E.10)}$$

con lo cual, los coeficientes para la ecuación (E.5) son:

$$p = 2\varepsilon_w\ \sigma A_w/(2 - \varepsilon_w) \qquad \text{(E.6)}$$

$$q = (\tau_w \rho)^{1/2}\ Cp A_w/\ T^+ \qquad \text{(E.7)}$$

$$r = (\tau_w \rho)^{1/2}\ Cp A_w T/\ T^+ + 2\varepsilon_w\ A_w Fx_P/(2 - \varepsilon_w) \qquad \text{(E.8)}$$

ANEXO F : ECUACION PARA LA DISIPACION VISCOSA EN LA REGION PROXIMA A UNA PARED

La generación de energía cinética turbulenta, dada por la ecuación (2.5) puede expresarse en términos de los esfuerzos de corte (en flujo axisimétrico) como[5]:

$$G = 2\mu_{eff}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{v}{r}\right)^2\right] + \frac{1}{\mu_{eff}}\left[\tau_{rx}^2 + \tau_{r\theta}^2 + \tau_{x\theta}^2\right] \tag{F.1}$$

Por su parte, la fuente de disipación viscosa es:

$${}_{\Phi}S^h = -\frac{\partial}{\partial x}(\tau_{xx}u + \tau_{xr}v + \tau_{x\theta}w) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}[r(\tau_{rx}u + \tau_{rr}v + \tau_{r\theta}w)] \tag{F.2}$$

En la región muy próxima a las paredes puede considerarse que los esfuerzos son aproximadamente constantes[6] , por lo que (F.2) se convierte en

$${}_{\Phi}S^h = -\left[\tau_{xx}\frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xr}\frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{x\theta}\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{r}\left(\tau_{rx}\frac{\partial}{\partial r}(ru) + \tau_{rr}\frac{\partial}{\partial r}(rv) + \tau_{r\theta}\frac{\partial}{\partial r}(rw)\right)\right] \tag{F.3}$$

Los términos en (F.3) pueden desarrollarse, mediante las ecuaciones (3.29) como:

$$\tau_{xx}\frac{\partial u}{\partial x} = -\mu_{eff}\left[2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - \frac{2}{3}\frac{\partial u}{\partial x}\left(\nabla \cdot v_g\right)\right] \tag{F.4}$$

$$\tau_{xr}\frac{\partial v}{\partial x} = -\mu_{eff}\left[\frac{\partial u}{\partial r}\frac{\partial v}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right] \tag{F.5}$$

$$\tau_{x\theta}\frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{\tau_{x\theta}^2}{\mu_{eff}} \tag{F.6}$$

$$\frac{1}{r}\tau_{rx}\frac{\partial}{\partial r}(ru) = -\mu_{eff}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)^2 + \frac{u}{r}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r}\frac{\partial v}{\partial x}\right] \tag{F.7}$$

$$\frac{1}{r}\tau_{rr}\frac{\partial}{\partial r}(rv) = -\mu_{eff}\left[2\left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2 + 2\frac{v}{r}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv)(\nabla \cdot \mathbf{v}_g)\right] \quad (F.8)$$

$$\frac{1}{r}\tau_{r\theta}\frac{\partial}{\partial r}(rw) = -\frac{\tau_{r\theta}^2}{\mu_{eff}} + 2\frac{w}{r}\tau_{r\theta} \quad (F.9)$$

Reemplazando (F.4) - (F.9) en (F.3) y agrupando términos se obtiene

$$\Phi S^h = 2\mu_{eff}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2\right] - \frac{2}{3}\mu_{eff}(\nabla \cdot \mathbf{v}_g)^2 + \mu_{eff}\frac{u}{r}\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)$$

$$+ \mu_{eff}\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{\mu_{eff}}(\tau_{x\theta}^2+\tau_{r\theta}^2) + 2\mu_{eff}\frac{v}{r}\frac{\partial v}{\partial r} - 2\frac{w}{r}\tau_{r\theta} \quad (F.10)$$

Sumando y restando $2\mu_{eff}(v/r)^2$ y empleando las ecuaciones (3.29d) y (F.1) se llega finalmente a

$$\Phi S^h = G - \frac{u}{r}\tau_{xr} - 2\frac{w}{r}\tau_{r\theta} + 2\mu_{eff}\left[\frac{v}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r}\right) - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \mathbf{v}_g)^2\right] \quad (F.11)$$

ANEXO G : FUNCION DE FASE PARA DISPERSION POR REFLEXION DIFUSA SOBRE PARTICULAS ESFERICAS[10]

Si una partícula refleja radiación en forma difusa, cada elemento de superficie que intercepta radiación la refleja dentro de todo el ángulo sólido sobre él (2π). Así, la radiación dispersada en una dirección dada surge de toda la región de la partícula que recibe radiación y que es visible desde la dirección considerada. Esta región se extiende entre 90° desde la dirección de observación hasta 90° desde la dirección de la radiación incidente (fig. G.1).

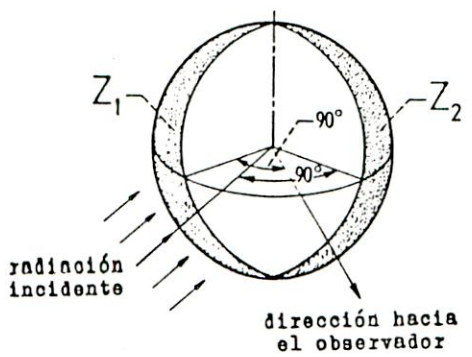


Fig. G.1 Z_1: zona no visible desde la dirección de observación ; Z_2: zona no irradiada

Para obtener la función de fase $P(\theta)$ debe calcularse la intensidad dispersada en un ángulo θ respecto a la dirección de la radiación incidente. Aunque en el capítulo 6 se considera independencia espectral, en el desarrollo que sigue se tomará la intensidad de radiación como dependiente de λ, para demostrar que tal supuesto no es limitante para la función de fase deducida.

Considérese la partícula esférica de radio R de la fig. G.2. El elemento de área dA está situado según las coordenadas esféricas (R,ψ,φ). El vector normal a dA, $\hat{n}$, forma ángulos β y α con las direcciones de incidencia y de observación respectivamente. La proyección de dA normal a la dirección de incidencia es $dA\cos\beta$, por lo que la energía (por unidad de tiempo) confinada en el ángulo sólido $d\Omega_i$ y captada en dA es $I_\lambda d\Omega_i d\lambda dA\cos\beta$. La fracción de esta energía que es reflejada será $\rho_\lambda I_\lambda d\Omega_i d\lambda dA\cos\beta$, suponiendo que el elemento dA refleja por igual en todas las direcciones. Luego, la energía reflejada por el elemento, por unidad de área y por ángulo sólido $d\Omega_s$ es:

$$E_{s\lambda} = \frac{1}{dA\ d\Omega_s\ d\lambda} \rho_\lambda I_\lambda\, d\Omega_i\, d\lambda\, dA\ \cos\beta = \frac{1}{d\Omega_s} \rho_\lambda I_\lambda\, d\Omega_i \cos\beta \qquad (G.1)$$

Según la ley del coseno de Lambert, la intensidad de radiación dispersada está dada por

$$I_{s\lambda} = E_{s\lambda}/\pi \qquad (G.2)$$

por lo que la energía reflejada en la dirección del observador es

$$I_{s\lambda}\, d\Omega_s\, d\lambda\, dA\ \cos\alpha = \frac{1}{\pi} \rho_\lambda I_\lambda\, d\Omega_i \cos\beta \cos\alpha\, d\lambda\, dA \qquad (G.3)$$

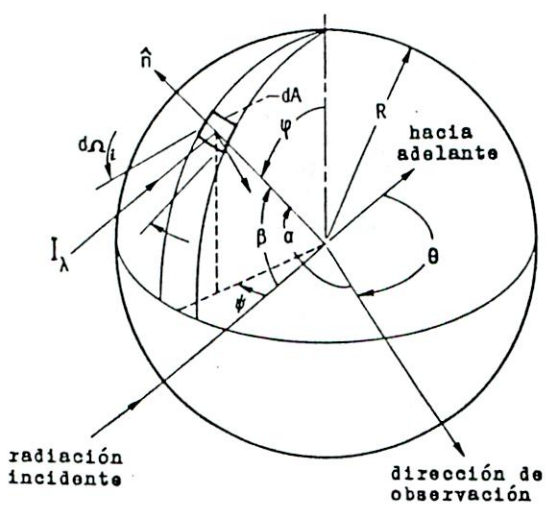


Fig. G.2

La energía total dispersada en la dirección del observador (θ) se obtiene integrando (G.3) sobre toda el área irradiada visible desde θ (A_v):

$$d^2 q_{s\lambda} = \frac{1}{\pi} \rho_\lambda I_\lambda\, d\Omega_i\, d\lambda \int_{A_v} \cos\beta \cos\alpha\, dA \qquad (G.4)$$

Según la fig.G.2 , $dA = R^2 \operatorname{sen}\varphi\, d\varphi\, d\psi$, y de la fig.G.3 se obtiene:

$$\cos\beta = \overline{OP}/R = \overline{OQ}\cos\psi\ /R = \operatorname{sen}\varphi \cos\psi \qquad (G.5)$$

$$\cos(\pi - \alpha) = \overline{OS}/R = \overline{OQ}\cos(\theta - \psi)\ /R = \operatorname{sen}\varphi \cos(\theta - \psi) \qquad (G.6)$$

de donde, $\cos\alpha = \operatorname{sen}\varphi \cos(\pi + \psi - \theta)$ (G.7)

Por lo tanto, en (G.4) se obtiene

$$d^2q_{s\lambda} = \frac{1}{\pi}\rho_\lambda I_\lambda d\Omega_i d\lambda R^2 \int_0^{\pi} \int_{-\pi/2}^{\theta-\pi/2} sen^3\varphi \cos\psi \cos(\pi + \psi - \theta)\, d\psi\, d\varphi$$

$$= \frac{1}{\pi}\rho_\lambda I_\lambda d\Omega_i d\lambda R^2 \frac{2}{3}(sen\theta - \theta\cos\theta) \qquad (G.8)$$

La energía, por unidades de longitud de onda, área y ángulo sólido de la radiación incidente, dispersada en la dirección θ y confinada el ángulo sólido $d\Omega_s$ resulta:

$$I_{s\lambda}(\theta) = \frac{d^2q_{s\lambda}}{\pi R^2 d\Omega_i d\lambda} = \rho_\lambda I_\lambda \frac{2}{3\pi^2}(sen\theta - \theta\cos\theta) \qquad (G.9)$$

Si la dispersión fuera isotrópica, la intensidad dispersada en cualquier dirección sería $\rho_\lambda I_\lambda / 4\pi$. Por lo tanto, de acuerdo a lo dicho en 6.1, la función de fase es

$$P(\theta) = \frac{I_{s\lambda}(\theta)}{\rho_\lambda I_\lambda / 4\pi} = \frac{8}{3\pi}(sen\theta - \theta\cos\theta) \qquad (G.10)$$

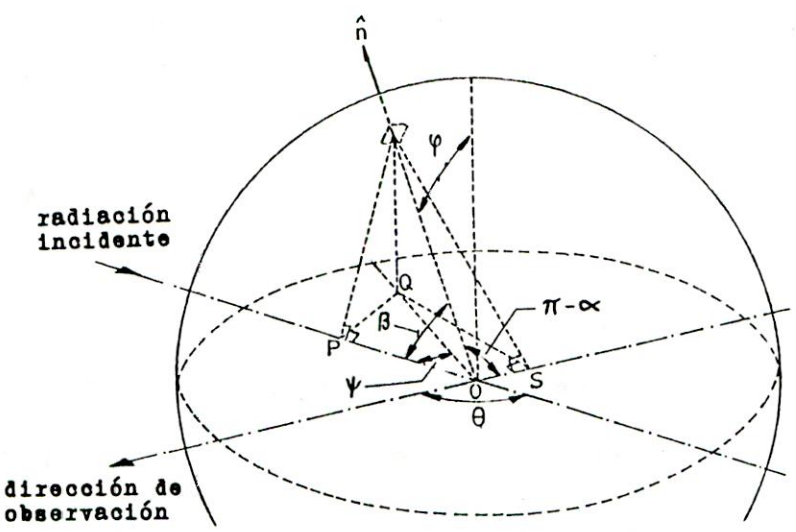


Fig. G.3

ANEXO H : OBTENCION DE FRACCIONES DE DISPERSION ANISOTROPICA

Dado el elemento de área dA_1 (fig. H.1) normal a la dirección de la radiación incidente, la intensidad total dispersada hacia adelante se obtiene integrando la componente en dicha dirección de la intensidad dispersada, sobre el ángulo sólido comprendido por el hemisferio que muestra la figura.

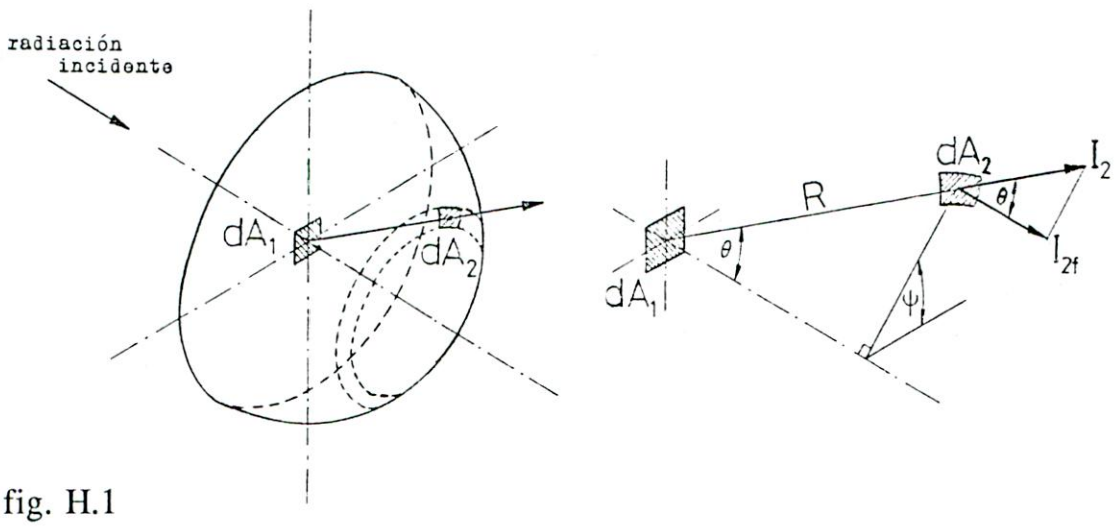


fig. H.1

El elemento dA_2 situado sobre el hemisferio subtiende el ángulo sólido

$$d\Omega_s = dA_2/R^2 = \text{sen}\theta \, d\psi \, d\theta \qquad \text{(H.1)}$$

La intensidad dispersada confinada en $d\Omega$ es

$$I_2 = I_s(\theta) \cos\theta \, d\Omega_s \qquad \text{(H.2)}$$

cuya componente hacia adelante está dada por

$$I_{2f} = I_2 \cos\theta \qquad \text{(H.3)}$$

Por lo tanto, la intensidad total dispersada hacia adelante resulta

$$I_{sf} = \int_{\Omega=2\pi} I_s(\theta) \cos^2\theta \, d\Omega_s = \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} I_s(\theta) \cos^2\theta \, \text{sen}\theta \, d\psi \, d\theta \qquad \text{(H.4)}$$

es decir, $$I_{sf} = 2\pi \int_0^{\pi/2} I_s(\theta) \cos^2\theta \, \mathrm{sen}\theta \, d\theta \qquad (H.5)$$

Si la dispersión fuese isotrópica se tendría $I_s(\theta) = I_{st}/4\pi$,con I_{st} la intensidad total dispersada. Luego, para la función de fase se cumple que

$$P(\theta) = \frac{I_s(\theta)}{\frac{1}{4\pi} I_{st}} \qquad (H.6)$$

Reemplazando $I_s(\theta)$ en (H.5) en términos de la función de fase mediante esta última ecuación se llega finalmente a la fracción de dispersión hacia adelante:

$$f = \frac{I_{sf}}{I_{st}} = 2\pi \int_0^{\pi/2} \frac{P(\theta)}{4\pi} \cos^2\theta \, \mathrm{sen}\theta \, d\theta \qquad (H.7)$$

Para la fracción de dispersión hacia atrás el desarrollo es completamente análogo, efectuándose la integración sobre el hemisferio opuesto, de modo que

$$b = 2\pi \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{P(\theta)}{4\pi} \cos^2\theta \, \mathrm{sen}\theta \, d\theta \qquad (H.8)$$

Ya que se ha supuesto que la dispersión es simétrica respecto a la dirección de incidencia, las fracciones de dispersión en las cuatro direcciones laterales son todas iguales, por lo que pueden calcularse simplemente distribuyendo por igual en dichas direcciones el resto de la radiación dispersada:

$$s = \frac{1}{4}(1 - f - b) \qquad (H.9)$$

Es claro que para el caso isotrópico $P(\theta) = 1$ y las expresiones anteriores se reducen a $f = b = s = 1/6$, como debe ser.

Substituyendo ahora $P(\theta)$ por la función (6.6) y resolviendo la integral se tiene:

$$f = J(\pi/2) - J(0) \qquad \text{(H.10)}$$

$$b = J(\pi) - J(\pi/2) \qquad \text{(H.11)}$$

con
$$J(\theta) = \frac{1}{2}\int \frac{8}{3\pi}(\operatorname{sen}\theta - \theta\cos\theta)\cos^2\theta \operatorname{sen}\theta \, d\theta$$

$$= \frac{1}{3\pi}\left(\frac{\theta}{8} - \frac{1}{4}\operatorname{sen}2\theta - \frac{5}{32}\operatorname{sen}4\theta + \theta\cos^4\theta\right) \qquad \text{(H.12)}$$

Por lo tanto, $f = 1/48$; $b = 17/48$; $s = 15/96$.

ANEXO I : DESARROLLO DEL METODO DE 4 FLUJOS[2]

De acuerdo a lo señalado en 6.5.1, para cada uno de los 6 flujos de la fig. 6.2 se plantea una ecuación de balance de energía al atravesar un elemento de volumen. En la dirección +x el cambio en el flujo F_x^+ por unidad de distancia recorrida es dF_x^+/dx. Derivando la ecuación (6.1) respecto a l se obtiene la variación de intensidad por unidad de distancia recorrida a través de un medio atenuante:

$$\frac{dI}{dl} = - K_t I \qquad (I.1)$$

Por lo tanto, para el flujo F_x^+ la pérdida de intensidad debido a la absorción y dispersión es

$$-(K_a + K_s)F_x^+$$

De la radiación total dispersada, una fracción f lo es hacia adelante, de modo que existe un incremento

$$+ f K_s F_x^+$$

por lo que la pérdida neta por dispersión es $-(1 - f) K_s F_x^+$. Hay además una ganancia para F_x^+ debido a la contribución de la dispersión de los otros flujos. El flujo F_x^- aporta con su fracción de dispersión hacia atrás, y los flujos perpendiculares a x lo hacen con su dispersión hacia los lados. Todo esto representa un aumento de

$$+ b K_s F_x^- + s K_s (F_r^+ + F_r^- + F_\theta^+ + F_\theta^-)$$

F_x^+ es reforzado también por la emisión de radiación dentro del elemento de volumen. Suponiendo que ésta se distribuye uniformemente en todas las direcciones, la contribución a F_x^+ será

$$+ \frac{1}{6} K_a \sigma T_e^4$$

Sumando todos estos términos

$$\frac{dF_x^+}{dx} = - K_a F_x^+ - (1-f)\, K_s F_x^+ + b\, K_s F_x^- + s\, K_s (F_r^+ + F_r^- + F_\theta^+ + F_\theta^-) + \frac{1}{6} K_a \sigma T_e^4$$

(I.2)

Definiendo el parámetro $W_o = K_s / K_t$ (albedo) y agrupando términos esta ecuación se puede reescribir como

$$\frac{1}{K_t}\frac{dF_x^+}{dx} = -(1-W_o f) F_x^+ + W_o b F_x^- + W_o s(F_r^+ + F_r^- + F_\theta^+ + F_\theta^-) + \frac{1}{6} (1-W_o) \sigma T_e^4$$

(I.3)

En forma análoga se obtienen las ecuaciones para las otras direcciones:

$$\frac{-1}{K_t}\frac{dF_x^-}{dx} = -(1-W_o f) F_x^- + W_o b F_x^+ + W_o s(F_r^+ + F_r^- + F_\theta^+ + F_\theta^-) + \frac{1}{6} (1-W_o) \sigma T_e^4$$

(I.4)

$$\frac{1}{K_t r}\frac{d}{dr}(rF_r^+) = -(1-W_o f) F_r^+ + {}_o b F_r^- + W_o s(F_x^+ + F_x^- + F_\theta^+ + F_\theta^-) + \frac{1}{6} (1-W_o) \sigma T_e^4$$

(I.5)

$$\frac{-1}{K_t r}\frac{d}{dr}(rF_r^-) = -(1-W_o f) F_r^- + W_o b F_r^+ + W_o s(F_x^+ + F_x^- + F_\theta^+ + F_\theta^-) + \frac{1}{6} (1-W_o) \sigma T_e^4$$

(I.6)

$$\frac{1}{K_t r}\frac{dF_\theta^+}{d\theta} = -(1-W_o f) F_\theta^+ + W_o b F_\theta^- + W_o s(F_x^+ + F_x^- + F_r^+ + F_r^-) + \frac{1}{6} (1-W_o) \sigma T_e^4$$

(I.7)

$$\frac{-1}{K_t r}\frac{dF_\theta^-}{d\theta} = -(1-W_o f) F_\theta^- + W_o b F_\theta^+ + W_o s(F_x^+ + F_x^- + F_r^+ + F_r^-) + \frac{1}{6} (1-W_o) \sigma T_e^4$$

(I.8)

La condición de simetría axial implica que $F_\theta^+ = F_\theta^-$ y $dF_\theta^+/d\theta = dF_\theta^-/d\theta$. Empleando estas relaciones se despeja F_θ^+ o F_θ^- de (I.7) o (I.8) y se reemplaza el resultado en (I.3) - (I.6), con lo que se obtienen las llamadas ecuaciones de flujo:

$$\frac{dF_x^+}{dx} = - C_1F_x^+ + C_2F_x^- + C_3(F_r^+ + F_r^-) + C_4 \qquad (I.9)$$

$$\frac{dF_x^-}{dx} = C_1F_x^- - C_2F_x^+ - C_3(F_r^+ + F_r^-) - C_4 \qquad (I.10)$$

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rF_r^+) = - C_1F_r^+ + C_2F_r^- + C_3(F_x^+ + F_x^-) + C_4 \qquad (I.11)$$

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rF_r^-) = C_1F_r^- - C_2F_r^+ - C_3(F_x^+ + F_x^-) - C_4 \qquad (I.12)$$

con $$C_1 = K_t(1 - W_of - W_osD) \qquad (I.13)$$

$$C_2 = K_t(W_ob + W_osD) \qquad (I.14)$$

$$C_3 = K_t(W_os + W_osD) \qquad (I.15)$$

$$C_4 = K_t\sigma T_e^4\left[\frac{1}{6}(1-W_o)(1 + D)\right] \qquad (I.16)$$

$$D = 2W_os/(1 - W_of - W_ob) \qquad (I.17)$$

Se introducen ahora las variables Fx y Fr. Sumando (I.9) e (I.10) y empleando la definición de Fx (6.21) se tiene

$$\frac{dF_x^+}{dx} + \frac{dF_x^-}{dx} = -(C_1 + C_2)(F_x^+ - F_x^+) = 2\frac{dFx}{dx} \qquad (I.18)$$

de donde, según la definición de Qx, se deduce que

$$Qx = 2\Gamma\frac{dFx}{dx} \qquad (I.19)$$

con $$\Gamma = -1/(C_1 + C_2) \qquad (I.20)$$

La derivada de Qx obtenida a partir (I.9) e (I.10) es

$$\frac{dQx}{dx} = \frac{dF_x^+}{dx} - \frac{dF_x^-}{dx} = (C_2 - C_1)Fx - (2C_3Fr + C_4) \qquad (I.21)$$

Substituyendo Qx por (I.19) se llega entonces a

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma \frac{dFx}{dx}\right) - (C_2 - C_1)Fx - (2C_3Fr + C_4) = 0 \qquad (I.22)$$

Procediendo de igual modo en la dirección radial, la suma de (I.11) e (I.12) da

$$\frac{1}{r}\left[\frac{d}{dr}(rF_r^+) + \frac{d}{dr}(rF_r^-)\right] = -(C_1 + C_2)(F_r^+ - F_r^-) = \frac{2}{r}\frac{d}{dr}(r\,Fr) \qquad (I.23)$$

por lo tanto $$Qr = 2\Gamma \frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r\,Fr) \qquad (I.24)$$

y su resta es

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r\,Fr) = \frac{1}{r}\left[\frac{d}{dr}(rF_r^+) - \frac{d}{dr}(rF_r^-)\right] = (C_2 - C_1)Fr - (2C_3Fx + C_4) \qquad (I.25)$$

por lo tanto $$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\Gamma\frac{d}{dr}(r\,Fr)\right) - (C_2 - C_1)Fr - (2C_3Fx + C_4) = 0 \qquad (I.26)$$

ANEXO J : DISCRETIZACION DE LAS ECUACIONES DEL MODELO DE 4 FLUJOS

El primer término de la ecuación (6.23) se puede discretizar como

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{dFx}{dx}\right) = \frac{1}{\Delta x_{ew}}\left(\Gamma_e \frac{dFx}{dx}\Big|_e - \Gamma_w \frac{dFx}{dx}\Big|_w\right)$$

$$= \frac{1}{\Delta x_{ew}}\left(\Gamma_e \frac{Fx_E - Fx_P}{\Delta x_{EP}} - \Gamma_w \frac{Fx_P - Fx_W}{\Delta x_{PW}}\right) \qquad (J.1)$$

donde se emplea la notación de volumen de control de la fig. 5.1. Reemplazando (J.1) en (6.23), multiplicando por Δx_{ew} y agrupando términos se llega a:

$$\left[-\frac{\Gamma_e}{\Delta x_{EP}} - \frac{\Gamma_w}{\Delta x_{PW}} - (C_2 - C_1)\Delta x_{ew}\right]Fx_P = -\frac{\Gamma_e}{\Delta x_{EP}}Fx_E - \frac{\Gamma_w}{\Delta x_{PW}}Fx_W$$

$$+ (2C_3Fr_P + C_4)\Delta x_{ew} \qquad (J.2)$$

que corresponde a la forma estándar de la ecuación discretizada (6.34). Por lo tanto,

$$a_E = -\frac{\Gamma_e}{\Delta x_{EP}} \qquad (J.3)$$

$$a_W = -\frac{\Gamma_w}{\Delta x_{PW}} \qquad (J.4)$$

$$Sp^{Fx} = (C_2 - C_1)\Delta x_{ew} \qquad (J.5)$$

$$Su^{Fx} = (2C_3Fr_P + C_4)\Delta x_{ew} \qquad (J.6)$$

Según las definiciones de C_1 y C_2 se puede demostrar que para cualquier valor real de W_0 ,f,b y s, se cumple que $Sp^{Fx} \leq 0$ y a_E, $a_W > 0$, lo cual satisface los criterios de estabilidad para la ecuación discretizada.

Para la dirección radial se toma

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\Gamma\frac{d}{dr}(r\ Fr)\right) = \frac{1}{r_P}\frac{1}{\Delta r_{ns}}\left(\Gamma_n \frac{d}{dr}(r\ Fr)\Big|_n - \Gamma_s \frac{d}{dr}(r\ Fr)\Big|_s\right)$$

$$= \frac{1}{r_P\,\Delta r_{ns}}\left(\Gamma_n r_n \frac{Fr_N - Fr_P}{\Delta r_{NP}} - \Gamma_s r_s \frac{Fr_P - Fr_S}{\Delta r_{PS}}\right) \quad (J.7)$$

En este caso la derivada radial de Fr se discretiza usando el radio medio (r_n o r_s) en lugar de r_N ,r_P o r_P,r_S , pues esto último, aunque más exacto , lleva a una discretización[25] que no garantiza $Sp^{Fr} \leq 0$.

Reemplazando (J.7) en (6.24), multiplicando por Δr_{ns} y agrupando términos se obtiene

$$\left[-\frac{\Gamma_n r_n}{r_P \Delta r_{NP}} - \frac{\Gamma_s r_s}{r_P \Delta r_{PS}} - (C_2 - C_1)\Delta r_{ns}\right] Fr_P = -\frac{\Gamma_n r_n}{r_P \Delta r_{NP}} Fr_N - \frac{\Gamma_s r_s}{r_P \Delta r_{PS}} Fr_S$$

$$+ (2C_3 Fx_P + C_4)\Delta r_{ns} \quad (J.8)$$

y, por lo tanto, según (6.35),

$$a_N = -\frac{\Gamma_n r_n}{r_P \Delta r_{NP}} \quad (J.9)$$

$$a_S = -\frac{\Gamma_s r_s}{r_P \Delta r_{PS}} \quad (J.10)$$

$$Sp^{Fr} = (C_2 - C_1)\Delta r_{ns} \quad (J.11)$$

$$Su^{Fr} = (2C_3 Fx_P + C_4)\Delta r_{ns} \quad (J.12)$$

ANEXO K: FORMULACION ALTERNATIVA DE CONDICIONES DE CONTORNO PARA EL CAMPO RADIATIVO.

- Pared Norte:

Según lo expuesto en 6.5.4, la variación de F_r^+ al cruzar el VC adyacente a la pared puede considerarse haciendo

$$F_{rn}^+ = F_r^+ + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r\,F_r^+)\,\Delta r_{ns} \qquad (K.1)$$

Reemplazando la derivada mediante (6.20c) y empleando (J.12), esta ecuación se transforma en

$$F_{rn}^+ = F_r^+(1-C_1\Delta r_{ns}) + C_2\Delta r_{ns}\,F_r^- + Su^{Fr} \qquad (K.2)$$

La información sobre absorción y dispersión de F_r^+ se encuentra contenida en C_1 y C_2, mientras que Su^{Fr} contiene las contribuciones de la dispersión lateral de F_x^+ y F_x^- y la emisión del VC. Se substituye ahora F_r^+ por $2Fr-F_r^-$ y F_r^- por la expresión (6.38) y se despeja F_{rn}^+ como

$$F_{rn}^+ = \frac{AFr_P - B\varepsilon_w\sigma T_w^4 + Su^{Fr}}{1 + B(1 - \varepsilon_w)} \qquad (K.3)$$

con $$A = 2(1-C_1\Delta r_{ns}) \qquad (K.4)$$

$$B = 1-(C_1 + C_2)\Delta r_{ns} \qquad (K.5)$$

Usando este resultado y (6.38) en (6.37) se obtiene:

$$Qr_n = \frac{\varepsilon_w}{1+B(1-\varepsilon_w)}\,[A\,Fr_P + Su^{Fr} - (1+B)\sigma T_w^4] \qquad (K.6)$$

y la modificación al término fuente es

$$Sp^{Fr} = Sp^{Fr} - \frac{\varepsilon_w A}{1+B(1-\varepsilon_w)} \qquad (K.7)$$

$$Su^{Fr} = Su^{Fr}\left[\,1 - \frac{\varepsilon_w}{1+B(1-\varepsilon_w)}\,\right] + \frac{(1+B)\varepsilon_w\sigma T_w^4}{1+B(1-\varepsilon_w)} \qquad (K.8)$$

Si el VC no contiene partículas, $C_1 \ll 1$ y $C_2 = 0$ por lo que $A \approx 2$ y $B \approx 1$, y estas ecuaciones se reducen a (6.42) y (6.43). En esta última, la diferencia en el factor de Su^{Fr} no influye mayormente pues si no hay partículas $Su^{Fr} \ll \varepsilon_w \sigma T_w^4$.

- Pared oeste:

En este caso se toma:

$$F_{xw}^{-} = F_x^{-} - \frac{d}{dx}(F_x^{-}) \Delta x_{ew} \qquad (K.9)$$

Procediendo en forma análoga a la pared norte, mediante (6.20b), (J.19) y (6.44) se llega a

$$F_{xw}^{-} = \frac{CFx_P - D\varepsilon_w \sigma T_w^4 + Su^{Fx}}{1 + D(1 - \varepsilon_w)} \qquad (K.10)$$

con $$C = 2(1-C_1 \Delta x_{ew}) \qquad (K.11)$$

$$D = 1-(C_1 + C_2)\Delta x_{ew} \qquad (K.12)$$

y, por lo tanto

$$Qx_w = \frac{\varepsilon_w}{1+D(1-\varepsilon_w)} [(1+D)\sigma T_w^4 - CFx_P - Su^{Fx}] \qquad (K.13)$$

$$Sp^{Fx} = Sp^{Fx} - \frac{\varepsilon_w C}{1+D(1-\varepsilon_w)} \qquad (K.14)$$

$$Su^{Fx} = Su^{Fx} \left[1 - \frac{\varepsilon_w}{1+D(1-\varepsilon_w)} \right] + \frac{(1+D)\varepsilon_w \sigma T_w^4}{1+D(1-\varepsilon_w)} \qquad (K.15)$$