

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA ENERGÍA – SISTEMAS ENERGÉTICOS

SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL PROCESO DE MEZCLADO PARA EL ESTUDIO DE UN QUEMADOR DE LLAMA DIFUSIVA INVERSA

TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN INGENIERÍA

> PRESENTA: ISMAEL MEJÍA FIGUEROA

TUTOR PRINCIPAL DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA

CIUDAD DE MÉXICO, ENERO 2018

JURADO ASIGNADO:

Presidente:	DR. GABRIEL ASCANIO GASCA
Secretario:	DR. JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE
Vocal:	DR. MARTÍN SALINAS VAZQUEZ
1 er. Suplente:	DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ
2 do. Suplente:	DR. GABRIEL LEÓN DE LOS SANTOS

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM

TUTOR DE TESIS:

DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ

FIRMA

Agradecimientos

A mi familia, por todo el apoyo que me brindan.

Al Dr. Martín Salinas Vázquez, por darme la oportunidad de trabajar con él, por darse el tiempo en la dirección de este trabajo y por compartir sus enseñanzas.

Al M.I. Christian Lagarza Cortés por su paciencia y enseñanzas durante esta etapa.

Al M.I. Jorge Ramírez Cruz por compartir su conocimiento y su apoyo en la realización de este trabajo.

A mis compañeros del Instituto de Ingeniería, por los buenos momentos compartidos y por apoyarme en esta etapa.

A todos los que directamente o indirectamente me han brindado ayuda para la realización de este trabajo.

Resumen

El proceso de mezclado en un quemador de llama difusiva inversa es analizado por medio de un estudio no reactivo utilizando dinámica de fluidos computacional. El quemador consiste en una boquilla central por medio de la cual se emite aire como oxidante y cuatro boquillas anulares por medio de las cuales se emite metano como combustible. Estableciendo los casos de simulación de acuerdo a la relación de equivalencia primaria y estudiando el flujo, se determinan las regiones inflamables. La alternativa de simulación empleada es la simulación a grandes escalas. Modelos de mezcla de propiedades son implementados para aumentar la aproximación y disminuir el error de la simulación. La longitud del núcleo potencial de los chorros de combustible tiene relación con la relación de equivalencia primaria, así como a la relación de densidad entre el combustible y el fluido del medio. Las zonas de recirculación en el flujo son identificadas. La evolución de la distribución radial de las concentraciones de combustible a lo largo de la dirección longitudinal es evaluada, teniendo una importante relación con la formación de la región inflamable en la cámara en todos los casos de estudio. La formación de la región inflamable está estrechamente relacionada con la relación de equivalencia primaria de cada caso de simulación.

Índice

Res	umen II
Just	ificación1
Obj	etivos2
1.	Introducción
2.	Ecuaciones de Gobierno y Esquema Numérico14
3.	Validación de la Herramienta Numérica26
4.	Configuración del sistema y casos de estudio37
5.	Resultados de los casos de estudio43
6.	Conclusiones
Bib	liografía68

Justificación

El petróleo continúa siendo el protagonista en el modelo energético mundial, debido su participación en la producción de energía primaria, la oferta interna bruta de energía, el comercio internacional y el consumo global. Con respecto al contexto nacional, se considera indispensable debido a su influencia en los ingresos del presupuesto público y en la satisfacción de las necesidades energéticas del país.

Actualmente más de la mitad de las reservas reportadas dentro de territorio nacional corresponden a petróleo crudo pesado, el cual debido a su alta densidad y viscosidad dificulta su transporte y, por lo tanto su producción. Por lo que se hace uso de métodos de recuperación mejorada que modifiquen las propiedades del sistema con el fin de facilitar su transporte y producción.

Debido a lo anterior, se encomendó el desarrollo de un método térmico de recuperación mejorada a un grupo de investigadores del Instituto de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México, de la Escuela Superior de Ingeniería Mecánica Eléctrica del Instituto Politécnico Nacional y del Instituto Mexicano del Petróleo. Este método de recuperación consiste en la generación de vapor en el yacimiento buscando aumentar la presión, aumentar la temperatura y disminuir la viscosidad del petróleo crudo para facilitar su producción.

Para lograr la generación de vapor se pretende el llevar a cabo el proceso de combustión en el yacimiento y, por lo tanto, el proceso de mezclado del combustible y el oxidante. Por lo que se decidió partir del análisis no reactivo a condiciones atmosféricas del proceso de mezclado.

El análisis no reactivo permite estudiar el flujo en la cámara, por lo que se decidió partir del análisis no reactivo a condiciones atmosféricas del proceso de mezclado.

El estudio numérico por medio de una herramienta de simulación otorga ventajas como la reducción de tiempos y costos de diseño o rediseño, alta accesibilidad, reproducción de diferentes escenarios difíciles de realizar experimentalmente, reproducción de diferentes casos de simulación bajo distintas condiciones, así como la visualización detallada de los resultados.

Además de las ventajas mencionadas, el desarrollo del estudio numérico del proceso de mezclado no reactivo a condiciones atmosféricas permite el análisis del flujo bajo distintas condiciones, así como su influencia en el proceso de mezclado, permitiendo la identificación de las regiones inflamables dentro del flujo, lo cual es el objeto de estudio del presente trabajo.

Objetivos

Objetivo general

• Realizar el estudio numérico del proceso no reactivo de mezclado realizado por un quemador de llama difusiva inversa a condiciones atmosféricas en una cámara.

Objetivos particulares

- Estudiar y analizar el flujo que involucra el proceso de mezclado
- Determinar las regiones inflamables de acuerdo al proceso de mezclado y a los límites de inflamabilidad

1. Introducción

Actualmente, la combustión es un elemento fundamental de diversos programas de investigación y desarrollo. Dichos programas pueden ser desde estudios fundamentales hasta proyectos relacionados con el desarrollo de equipos de combustión, así como en la mejora de dichos equipos (Keating, 1993).

La combustión es una reacción exotérmica que libera energía en forma de calor y llamas como reacciones de combustión que se pueden propagar a través de un medio adecuado. La mayoría de los procesos de combustión suceden con la presencia de un combustible y un oxidante, los cuales son mezclados y quemados. Y donde el proceso de mezclado está directamente relacionado con la eficiencia de la combustión (El-Mahallawy & El-Din Habik, 2002).

Tipos de llamas de acuerdo al proceso de mezclado

A pesar de que el presente trabajo es un estudio no reactivo, es de gran utilidad conocer la categorización de la combustión, la cual es presentada generalmente en la figura 1.1.

Dicha categorización puede ser en llamas premezcladas y no premezcladas, de acuerdo a como se mezclan el combustible y el oxidante. Pudiéndose subdividir estas categorías de acuerdo al régimen del flujo (Warnatz, Maas, & Dibble, 2006). Por lo que existe una relación entre el tipo de mezclado, de quemador y de llama.



Fig. 1.1. Categorización de la combustión de acuerdo a como se mezclan el combustible y el oxidante

Las llamas premezcladas son el tipo de combustión en la que el combustible y el oxidante son mezclados antes de ser introducidos a la zona de reacción (McAllister, Chen, & Fernandez-Pello, 2011). Dentro de las principales ventajas que otorga este tipo de llama es que son más limpias y queman más intensamente en comparación con las llamas no premezcladas. Por otro lado, dentro de las principales desventajas que presentan es que su rango de operación es estrecho debido a la probable existencia de fenómenos como el flashback o el de lift-off (Sze, 2006). Además, debido a que el combustible y el oxidante son premezclados, aumenta el riesgo de explosión (McAllister et al., 2011). Mientras que las llamas no premezcladas, también conocidas como llamas difusivas, tanto el combustible como el oxidante se encuentran separados y su transporte a la zona de reacción es independiente, donde son mezclados. (Sze, 2006). Y como anteriormente se mencionó, debido a que el combustible y el oxidante no están premezclados, disminuye el riesgo de explosión no controlada, otorgando mejores condiciones de seguridad.

Las llamas no premezcladas se pueden clasificar en llamas difusivas normales y llamas difusivas inversas (Riahi, Mergheni, Sautet, & Ben Nasrallah, 2013). Donde se denomina como llama difusiva normal a la que es formada alrededor de un chorro de combustible rodeado por un flujo de oxidante, y como llama difusiva inversa a la que es formada alrededor de un chorro del oxidante rodeado por un flujo de combustible (Komiyama, Fujimura, Takagi, & Kinoshita, 2005).

Quemadores de llama difusiva inversa

De acuerdo a lo anterior, se puede considerar como quemador de llama difusiva inversa a aquel con el que se forma una llama alrededor de un chorro del oxidante rodeado por un flujo de combustible.

Dentro de las ventajas que otorgan los quemadores de llama difusiva inversa se pueden mencionar:

- Presenta límites de inflamabilidad más amplios que las llamas premezcladas (Barakat, Kamal, Saad, & Eldeeb, 2014).
- Genera una combustión más eficiente en comparación con la llama difusiva normal (Barakat et al., 2014).
- De acuerdo a la relación de velocidades de inyección del combustible y el oxidante, la llama difusiva inversa puede comportarse como llama difusiva en caso de que la velocidad del oxidante no sea lo suficientemente alta o como llama parcialmente premezclada en caso de que dicha velocidad sea lo suficientemente alta. Donde en este último caso se obtienen beneficios de una llama difusiva como el contar con un amplio rango de inflamabilidad, además de obtener beneficios de las llamas premezcladas, debido a la región parcialmente premezclada, como una combustión más limpia que la de una llama difusiva normal (Sze, Cheung, & Leung, 2006).

Dentro de los distintos tipos de quemadores de llama difusiva inversa son dos los principales, los cuales son: los quemadores de llama difusiva inversa con boquillas organizadas coaxialmente, los cuales consisten en dos boquillas concéntricas donde por medio de la boquilla interior se emite el chorro de oxidante y por medio de una boquilla coaxial se emite un chorro exterior de combustible (Sze et al., 2006); y los quemadores de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente, en los cuales la boquilla coaxial exterior es sustituida por un conjunto de puertos, el cual puede variar en número, organizados circunferencialmente (Sze, 2006). Las figuras 1.2 y 1.3 muestran esquemas tanto del quemador de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente.



Fig. 1.2. Esquema de un quemador de llama difusiva inversa con boquillas organizadas coaxialmente



Fig. 1.3. Esquema de quemador de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente

Quemador de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente

Este tipo de quemador es de nuestro interés debido a que es el tipo con el cual se desarrolla el proceso de mezclado en el presente trabajo.

La principal ventaja que presenta el quemador con boquillas organizadas circunferencialmente, en comparación con el quemador con boquillas organizadas coaxialmente, es que mejora la eficiencia de mezclado debido principalmente al aumento del área de contacto entre el combustible y el oxidante, y a la interacción entre los chorros de combustible (Sze, 2006).

Las características de una llama difusiva inversa están relacionadas con la dinámica de los chorros (Barakat, Salem, Morgan, & Saad, 2013). Es conveniente una breve mención de la dinámica de chorros para poder abordar el estudio de los flujos a analizar. La revisión se limita a condiciones subcríticas.

Flujo de un chorro sencillo

Las características principales de la dinámica de un chorro sencillo libre pueden ser estudiadas por medio de la situación experimental ideal en la cual un chorro de un fluido newtoniano emerge estacionariamente por medio de una boquilla de diámetro interior D_b a una velocidad v_b en un ambiente inactivo del mismo fluido. Dicho flujo estadísticamente es axisimétrico y estacionario. Además, a medida que se incrementa la distancia en la dirección longitudinal con respecto al punto de inyección, la componente longitudinal de la velocidad en la línea central del chorro disminuye, mientras que el flujo se dispersa y consecuentemente incrementa su amplitud (Pope, 2000).

El proceso por medio del cual se arrastra fluido del medio circundante hacia dentro del chorro debido a fuerzas de fricción, y que en este caso son debido a las fuerzas viscosas, es conocido como arrastre y es importante en este tipo de flujo (Kundu & Cohen, 2002). Este ocasiona que el flujo de cantidad de movimiento permanezca constante y que, por el otro lado, el flujo másico aumente conforme al incremento de la distancia en la dirección longitudinal con respecto al origen. Además de considerarse como un parámetro importante en el proceso de mezclado, el cual se da entre el fluido inyectado mediante el chorro y el fluido del ambiente (Ball, Fellouah, & Pollard, 2012). La formación y el crecimiento de la capa de mezcla se origina en el borde de la boquilla entre el ambiente inactivo y el núcleo potencial, este último es la región de flujo a velocidad v_b de la boquilla y donde el flujo es considerado casi invíscido (White, 1991).

Como se puede apreciar en la figura 1.4, durante la región de desarrollo inicial, el perfil del flujo cambia su forma aproximadamente cuadrada a una forma redondeada o gaussiana. En seguida, aún dentro de la región de desarrollo, los perfiles de velocidad promedio cambian conforme a la dispersión del chorro y al aumento de su amplitud, sin embargo su forma no cambia. Más allá de la región de desarrollo del flujo, el perfil de velocidad promedio se hace auto-semejante. Por lo que los perfiles radiales de velocidad promedio colapsan en una sola curva (Pope, 2000). La presión es casi constante en este tipo de flujo, con excepción de pequeñas variaciones debido a pequeñas fluctuaciones de velocidad en la capa cortante (White, 1991).



Fig. 1.4. Esquema lateral de las regiones que se forman en un chorro redondo libre turbulento

El número de Reynolds en este tipo de flujo está definido por:

$$Re = \frac{v_b D_b}{v_b} \tag{1.1}$$

Donde *Re* es el número de Reynolds del flujo, v_b es la viscosidad cinemática del fluido que es inyectado por medio del chorro y D_b es diámetro interior de la boquilla (Pope, 2000). Se recomienda un $Re > 10^4$ para sostener un flujo turbulento completamente desarrollado, de acuerdo a datos sobre mezclado turbulento, así como de otros fenómenos de flujo. El intervalo presentado del número de Reynolds es recomendado para el desarrollo de simulaciones numéricas directas y puede ser útil para simulaciones de grandes escalas (Dimotakis, 2000).

Por otra parte, existe el caso de un chorro confinado, como se muestra en la figura 1.5. En Kandakure, Patkar, & Patwardhan (2008) sugieren que los efectos del confinamiento son significativos en un tanque de seccion transversal cuadrada para una relación diámetros del tanque y de la boquilla del chorro menor que $50D_b$. Mientras que en Wang, Fröhlich, Michelassi, & Rodi (2008), el sistema es considerado como débilmente confinado para una relación diámetros del tanque y de la boquilla del chorro de $11D_b$. Estas paredes causan que el arrastre del chorro sea alimentado por un flujo inverso fuera del chorro (Hussein, Capp, & George, 1994). Lo que está relacionado con un patrón de recirculación.



Fig. 1.5. Esquema lateral de las regiones que se forman en un chorro redondo confinado

Además, como se puede apreciar en la figura 1.6, un chorro puede tener la presencia de un coflujo, el cual es un flujo exterior al chorro en dirección paralela al mismo a una cierta velocidad (Ayech, Habli, Saïd, Bournot, & Le Palec, 2014). En el caso de un chorro confinado con coflujo se presenta el patrón de recirculación. Las características de la recirculación y su posición están relacionadas con los parámetros del flujo tanto del chorro como del coflujo, así como la relación entre ellos (Barchilon & Curtet, 1964).



Fig. 1.6. Esquema lateral de las regiones que se forman en un chorro redondo confinado con las presencia de coflujo

Los flujos turbulentos, tal y como es el caso de un chorro redondo turbulento, pueden presentar densidad variable debido a variaciones de temperatura o de composición. En el caso de chorros donde el fluido inyectado por medio del chorro posee una diferente densidad con respecto al fluido del ambiente, la relación de densidades tiene influencia en la tasa de decaimiento de la velocidad de la línea central, en la longitud del núcleo potencial, en la intensidad de la turbulencia, en los perfiles radiales tanto de la componente longitudinal de

la velocidad promedio como de fracción másica promedio, así como en las estructuras coherentes, entre otras características del flujo (Wang et al., 2008).

Wang et al. (2008) realizaron un estudio numérico de tres casos de chorros de densidad variable emitidos, cada uno, por una boquilla redonda con la presencia de un coflujo de aire a baja velocidad en un confinamiento debil, manteniendo en todos los casos el flujo de cantidad de movimiento constante. Variando el fluido inyectado por medio del chorro y, consecuentemente, modificando la relación de densidad en cada caso de simulación; correspondiendo a los casos estudiados experimentalmente por Amielh, Djeridane, Anselmet, & Fulachier (1996) y Djeridane, Amielh, Anselmet, & Fulachier (1996). Mencionando que el chorro de fluido con densidad menor que la del ambiente presenta una mayor tasa de decaimiento de la velocidad de la línea central del chorro y, por lo tanto, una menor longitud de su núcleo potencial, entre otras características. Además de que los perfiles radiales tanto de la componente longitudinal de la velocidad promedio como de fracción másica promedio se desarrollan más rápido con esta relación de densidad. Por lo que entre más ligero es el fluido del chorro, el proceso de mezclado tiende a ser más rápido.

Por otro lado, mientras que en los chorros en los cuales la densidad es considerada constante existe auto-semejanza en los perfiles de velocidad promedio, en los chorros de densidad variable existe una auto-semejanza aproximada tanto en el perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio como en el perfil radial de fracción másica promedio, la cual es conocida como pseudo-semejanza (Wang et al., 2008). Para una discusión más completa consultar Wang et al. (2008) y Chen & Rodi (1980).

Flujo en arreglos de chorros múltiples

Dentro de los diferentes arreglos de chorros que pueden existir, el arreglo de chorros múltiples, mostrado en la figura 1.7, que consiste de un chorro central con múltiples chorros anulares emitiendo el mismo fluido es revisado debido a su semejanza con el quemador de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente.

Raghunathan & Reid (1981) realizaron un estudio experimental de chorros múltiples. Donde se evaluaron un chorro central sencillo, así como con diferentes números de chorros anulares. Reportando, entre otros puntos, la formación de un perfil de velocidad parecido al de un chorro sencillo debido a la interacción entre los perfiles de velocidad de los chorros anulares y el perfil de velocidad del chorro central, así como la reducción del ruido producida por este tipo de arreglos en comparación con chorros sencillos.



Fig. 1.7. Esquema lateral de un arreglo múltiple de chorros mostrando la formación de perfil similar al de un chorro sencillo

Manohar, Sundararajan, Ramjee, & Kumar (2004) realizaron un trabajo numérico y experimental de la interacción existente en un arreglo de chorros libres incompresibles. Además realizaron la validación de un chorro sencillo. Dicho arreglo consistió en cuatro boquillas anulares equidistantes a una boquilla central por las que se emitía aire. Los parámetros que variaron fue la distancia entre la boquilla central y las boquillas anulares P_b , así como el diámetro de los chorros anulares. Reportando, entre otros puntos, el incremento de la distancia de interacción entre los chorros anulares con el chorro central conforme al aumento de la distancia P_b , la presencia de una mayor tasa de arrastre en comparación con un chorro sencillo, el efecto de la disminución del tamaño de las boquillas anulares tanto en la distancia de interacción entre los chorros anulares con el chorro central conforme al avariación de la presión debido al arrastre y la influencia del aumento de la transferencia de cantidad de movimiento causada por la interacción de los chorros anulares con el chorro central conro central en la disminución de la tasa de decaimiento de los chorros anulares con el chorro central.

Flujo en quemadores de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente

El flujo en los quemadores de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente está relacionado al flujo en arreglos de chorros múltiples con la particularidad que fluidos diferentes son emitidos por la boquilla central y las boquillas anulares, correspondientes al combustible y al oxidante.

Para este tipo de quemadores, como se puede apreciar en la figura 1.8, el flujo se caracteriza por la formación de dos capas límite de mezcla oxidante-combustible las cuales son denominadas como "co-flowing boundary layer" y "submerged boundary layer". La "co-flowing boundary layer" también es denominada como "capa límite de mezcla aire-combustible interior" o como "capa límite interior". Mientras que la "submerged boundary

layer" también es denominada como "capa límite de mezcla aire-combustible exterior" o como "capa límite exterior". El presente trabajo se refiere a éstas como capa límite interior y capa límite exterior, respectivamente (Barakat et al., 2013).

Considerando únicamente un chorro anular de combustible y el chorro central de oxidante, la capa límite interior se forma cuando dos chorros son emitidos en la misma dirección y al momento de fluir paralelamente se mueven a distinta velocidad, lo cual está relacionado con la diferente densidad de los fluidos emitidos. En la frontera de los chorros se crea una superficie inestable, la cual posteriormente da paso a la formación de turbulencia. Esta formación de turbulencia aumenta conforme aumenta la distancia con respecto al plano de inyección de los chorros y propicia el transporte de masa, cantidad de movimiento y energía entre las dos corrientes. Consecuentemente, la formación de una capa oxidante-combustible tiene lugar, la cual aumenta conforme aumenta la distancia con respecto al plano de inyección. En esta capa, en la proximidad con el chorro de aire la mezcla oxidante-combustible es carente o pobre, mientras que es rica en la proximidad del chorro de combustible. Esta capa es una de las ventajas en comparación con los quemadores de llama difusiva normal (Barakat et al., 2013). Sucediendo esto con cada uno de los chorros anulares.



Fig. 1.8. Esquema lateral del proceso de mezclado en un quemador de llama difusiva inversa

La capa límite exterior se origina cuando los chorros anulares de combustible son emitidos al ambiente inactivo ocasionando una caída de presión, la cual arrastra al fluido del ambiente a la base de los chorros. Además debido a los efectos viscosos y a la diferencia de velocidades entre el ambiente inactivo y cada uno de los chorros, el fluido del ambiente es arrastrado a la velocidad del chorro de combustible. Nuevamente existiendo transporte de masa, cantidad de movimiento y energía en la capa formada de cada uno de los chorros. A medida que cada uno de los chorros anulares de combustible aumenta su distancia con respecto al plano de inyección, como generalmente sucede en los chorros, se expande y aumenta su masa. Esta capa tiene la característica de formarse antes que la capa límite interior, en caso de emitir todos los chorros, tanto de combustible como de oxidante, al mismo tiempo. Al igual que en la capa límite interior, la mezcla oxidante-combustible es rica en la proximidad con el chorro de combustible (Barakat et al., 2013).

Las características del flujo de un quemador de llama difusiva inversa, además de estar relacionadas con la dinámica de los chorros, están relacionas con la configuración del quemador. Dicha configuración del quemador está determinada por el área de flujo de combustible A_{fc} , el área de flujo de oxidante A_{fo} , la distancia entre centros de la boquilla central y las boquillas organizadas circunferencialmente P_b y el número de puertos N_b . Conforme la distancia P_b disminuye, aumenta el arrastre y el mezclado entre el chorro central de oxidante y los chorros anulares de combustible (Barakat et al., 2013).

Límites de inflamabilidad

Los límites de inflamabilidad indican el rango de relaciones de mezcla oxidantecombustible inflamables, en caso de llevarse a cabo el proceso de ignición. El límite inferior de inflamabilidad y el límite superior de inflamabilidad delimitan dicho rango de acuerdo al porcentaje del combustible en la mezcla. Si el porcentaje de combustible es menor al límite inferior de inflamabilidad o superior al límite superior de inflamabilidad, la llama no es capaz de propagarse (Sirisawat & Patvichaichod, 2012). Esta propiedad se puede analizar por medio de estudios no reactivos y está relacionada con la determinación de las regiones inflamables dentro del flujo. Los límites de inflamabilidad del combustible de los casos de estudio son presentados en la tabla 1.1.

Compuesto	Límite inferior de inflamabilidad (PV%)	Límite superior de inflamabilidad (PV%)	Fuente
CH ₄	5.26	14.3	Egerton & Powling (1948)
	5.0	15.0	Zabetakis (1965)

Tabla. 1.1. Límites de inflamabilidad de metano en aire a condiciones atmosféricas

Se recomienda, por seguridad para operaciones industriales, el uso de límites de inflamabilidad con propagación ascendente de la llama debido a que estos rangos son más amplios (Coward & Jones, 1952).

Otros trabajos

En los últimos años se han realizado diversos estudios para conocer las ventajas relacionadas a los quemadores de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente. Sin embargo, la mayoría de los estudios desarrollados son de flujo reactivo. En el presente trabajo se aborda el estudio de flujo no reactivo en este tipo de quemadores con el fin de conocer el efecto de los parámetros de flujo en el proceso de mezclado entre el oxidante y el combustible.

Presente estudio

Por parte de del grupo de investigadores que participan en el proyecto se propuso un quemador de llama difusiva inversa, el cual consta de una boquilla central por la que el oxidante es inyectado y cuatro boquillas anulares por medio de las cuales el combustible es inyectado, donde cada una de las boquillas anulares tiene el mismo diámetro entre sí. Dicha configuración es explicada en las próximas secciones junto con los casos de estudio, determinados de acuerdo a la relación de velocidad y a la relación de equivalencia primaria de cada uno de ellos.

En el siguiente capítulo, las ecuaciones de gobierno resueltas por la herramienta numérica y el esquema numérico utilizado para tal propósito son presentados. Posteriormente, el caso de validación y los casos de estudio, junto con sus respectivos resultados, son expuestos en sus respectivos capítulos. Finalmente, las conclusiones del presente estudio son presentadas en el último capítulo.

2. Ecuaciones de Gobierno y Esquema Numérico

En el presente capítulo se presentan las ecuaciones de gobierno, el esquema numérico empleado para resolver estas ecuaciones y los modelos utilizados para representar el fenómeno físico en estudio. Estas ecuaciones son resueltas por medio de una herramienta numérica, que ha sido utilizada previamente para representar flujos similares como en Salinas-Vázquez, Vicente, González-Rodríguez, Barrios-Bonilla, & Espinosa-Gayosso (2010). Adicionalmente, los modelos para el cálculo de las propiedades de transporte son implementados en el presente trabajo.

Ecuaciones de Gobierno

Las ecuaciones diferenciales de conservación de masa, de cantidad de movimiento, de la energía y de transporte de un escalar para flujo compresible son resueltas en su forma conservativa. En un marco cartesiano de referencia, las ecuaciones son:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x_1} + \frac{\partial G}{\partial x_2} + \frac{\partial H}{\partial x_3} = 0$$
(2.1)

Donde **U** es un vector de seis componentes.

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \\ \rho c \end{bmatrix}$$
(2.2)

Los vectores **F**, **G** y **H** son los flujos definidos como:

$$\boldsymbol{F} = \begin{bmatrix} \rho u_{1} \\ \rho u_{1} u_{1} + p \delta_{11} - 2\mu S_{11} \\ \rho u_{1} u_{2} + p \delta_{12} - 2\mu S_{12} \\ \rho u_{1} u_{3} + p \delta_{13} - 2\mu S_{13} \end{bmatrix}$$
(2.3)
$$\boldsymbol{F} = \begin{bmatrix} \rho e + p u_{1} - 2\mu u_{1} S_{11} - 2\mu u_{2} S_{12} - 2\mu u_{3} S_{13} - k \frac{\partial T}{\partial x_{1}} \\ \rho c u_{1} - \rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_{1}} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \rho u_{2} \\ \rho u_{2}u_{1} + p\delta_{21} - 2\mu S_{21} \\ \rho u_{2}u_{2} + p\delta_{22} - 2\mu S_{22} \\ \rho u_{2}u_{3} + p\delta_{23} - 2\mu S_{23} \end{bmatrix}$$
(2.4)
$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \rho u_{2} \\ \rho u_{2}u_{3} + p\delta_{23} - 2\mu u_{2}S_{22} - 2\mu u_{3}S_{23} - k \frac{\partial T}{\partial x_{2}} \\ \rho cu_{2} - \rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_{2}} \\ \rho u_{3}u_{1} + p\delta_{31} - 2\mu S_{31} \\ \rho u_{3}u_{2} + p\delta_{32} - 2\mu S_{32} \\ \rho u_{3}u_{3} + p\delta_{33} - 2\mu S_{33} \\ \rho cu_{3}u_{3} + p\delta_{33} - 2\mu S_{33} - k \frac{\partial T}{\partial x_{3}} \end{bmatrix}$$
(2.5)
$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} \rho u_{3} \\ \rho cu_{3} - \rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_{3}} \\ \rho cu_{3} - \rho \alpha \frac{\partial c}{\partial x_{3}} \end{bmatrix}$$
(2.5)

Los símbolos α , δ , μ , ρ , c, e, k, p, T, S_{ij} y u_i respresentan el coeficiente de difusión de la mezcla, la delta de Kronecker, la viscosidad dinámica de la mezcla, la densidad de la mezcla, la fracción volumétrica del combustible, la energía total específica, la conductividad térmica de la mezcla, la presión total de la mezcla, la temperatura de la mezcla respectivamente, el tensor rapidez de deformación y la componente del vector velocidad respectivamente (Salinas Vázquez & Métais, 2002; Salinas-Vázquez et al., 2010).

La energía total ρe definida para un gas ideal como en Ducros, Comte, & Lesieur (1996) y en Salinas Vázquez & Métais (2002):

$$\rho e = \rho C_{\nu} T + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)$$
(2.6)

En donde C_v representa el calor específico a volumen constante.

El tensor rapidez de deformación S_{ij} se expresa de la siguiente forma como en Ducros et al. (1996) y en Salinas Vázquez & Métais (2002):

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)$$
(2.7)

El sistema es cerrado por medio de la ecuación de estado para gas ideal como en Ducros et al. (1996) y en Salinas Vázquez & Métais (2002):

$$p = \rho RT \tag{2.8}$$

Donde:

$$R = \frac{R_u}{M} \tag{2.9}$$

Los símbolos R_u y M son la constante universal de los gases ideales y la masa molecular, respectivamente.

La relación de calores específicos es definida como en White (1991) y en Salinas Vázquez & Métais (2002):

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \tag{2.10}$$

En donde C_p representa el calor específico a presión constante y C_v , como se mencionó anteriormente, representa el calor específico a volumen constante.

La densidad de la mezcla es determinada por medio de la ecuación de estado para gas ideal (2.8), donde debido a la naturaleza de los casos de simulación la presión total de la mezcla y la temperatura se consideran constantes. Sin embargo, la presión total de la mezcla es determinada por medio de la presión de cada componente de acuerdo a la ley de las presiones aditivas de Dalton, las cuales son calculadas por medio de la fracción volumétrica c. Por lo que para el cálculo de la densidad de la mezcla, la ecuación de estado para gas ideal toma la siguiente forma:

$$\rho = \frac{p}{T\{[(c)(R_1)] + [(1.0 - c)(R_2)]\}}$$
(2.11)

Donde R_1 y R_2 son las constantes aparentes del gas de cada uno de los componentes de la mezcla, respectivamente.

Para todos los casos de simulación, las dimensiones de referencia consideradas son: la velocidad de inyección del chorro central u_b , el diámetro interior de la boquilla del chorro central D_b , la temperatura atmosférica T_b , la densidad ρ_b y las propiedades de la sustancia emitida por el chorro central a condiciones atmosféricas indicadas por medio del subíndice "*b*". Por medio de estas dimensiones de referencia, las ecuaciones que surgen de la ecuación (2.1) son adimensionalizadas.

A partir de dicha adimensionalización surgen el número de Reynolds $Re (Re = \rho_b u_b D_b/\mu_b)$, el número de Mach M (M = u_b/c_{s_b}), el número de Prandtl $Pr (Pr = \mu_b C_{p_b}/k_b)$, el número de Schmidt $Sc (Sc = \mu_b/\rho_b \alpha_b)$ y la relación de calores específicos γ en las ecuaciones. En el caso del cálculo del número de Schmidt Sc de referencia es considerado el coeficiente de difusión de la mezcla binaria de gases de cada caso en particular. Por lo que la herramienta numérica resuelve dichas ecuaciones en su forma adimensional y estos números adimensionales son los parámetros adimensionales de la simulación.

Alternativa de Simulación: Simulación de Grandes Escalas

La simulación de grandes escalas es una aproximación viable para la simulación de flujos turbulentos. Calculando directamente las grandes escalas del flujo turbulento y modelando las pequeñas escalas, las cuales tienden a ser isotrópicas y homogéneas. Por lo que ofrece la ventaja de identificar las grandes escalas, las cuales contienen gran parte de la energía turbulenta y son las responsables de la transferencia de cantidad de movimiento y mezclado turbulento, y de reducir el costo computacional en comparación con otras alternativas de simulación (Zhiyin, 2015).

Las ecuaciones de simulación son obtenidas por medio de la aplicación de un filtro espacial $G_{\Delta}(x)$ de tamaño Δ a las ecuaciones (2.1). Donde las escalas más pequeñas que Δ son las llamadas escalas sub-malla, las cuales son modeladas pero influyen estadísticamente en el movimiento de las grandes escalas (Salinas Vázquez & Métais, 2002).

El modelo submalla utilizado es el modelo de función estructural selectiva empleado en Salinas Vázquez & Métais (2002).

Para todos los casos de simulación y validación, el número de Prandtl turbulento Pr_t y el número de Schmidt turbulento Sc_t son 0.6 y 1.0, respectivamente; como en Salinas-Vázquez et al. (2010).

Ecuaciones en coordenadas generalizadas

El código numérico utilizado para resolver las ecuaciones usa coordenadas generalizadas. La adaptación es hecha por medio de una matriz jacobiana J, la cual es obtenida por medio del esquema numérico posteriormente mencionado y la cual transforma una geometría compleja en un sistema de coordenadas cartesianas (x_1, x_2, x_3) a una geometría ortogonal simple en sistema de coordenadas generalizadas (ξ_1, ξ_2, ξ_3) . Cada término de la matriz inversa J^{-1} de la matriz J es expresado como una función analítica de la métrica $\partial x_i/\partial \xi_j$, la cual es calculada por medio de un esquema interno de primer orden. Por lo que la matriz J es calculada directamente de J^{-1} (Salinas Vázquez & Métais, 2002). En el presente caso, esta adaptación es necesaria debido a la transformación de una malla no uniforme en un espacio bajo un sistema de coordenadas generalizadas, por lo que la espacio computacional bajo un sistema de coordenadas generalizadas, por lo que la ecuación (2.1) se puede escribir como la ecuación (2.12).

$$\frac{\partial \widehat{\boldsymbol{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{\boldsymbol{F}}}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \widehat{\boldsymbol{G}}}{\partial \xi_2} + \frac{\partial \widehat{\boldsymbol{H}}}{\partial \xi_3} = 0$$
(2.12)

Y por lo tanto:

$$\widehat{\boldsymbol{U}} = \frac{\boldsymbol{U}}{J} \tag{2.13}$$

$$\widehat{F} = \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} F \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} G \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_3} H \right) \right]$$
(2.14)

$$\widehat{\boldsymbol{G}} = \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \boldsymbol{F} \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \boldsymbol{G} \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_3} \boldsymbol{H} \right) \right]$$
(2.15)

$$\widehat{\boldsymbol{H}} = \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_1} \boldsymbol{F} \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_2} \boldsymbol{G} \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_3} \boldsymbol{H} \right) \right]$$
(2.16)

Donde J es el determinante de la matriz J y U está en función de las coordenadas cartesianas y el tiempo.

Esquema numérico

La discretización espacial es realizada por medio del empleo de la aproximación de diferencias finitas. Para la derivación espacial se hace uso del modelo presentado por Visbal & Gaitonde (2002).

$$\alpha_{d}\phi_{i-1}' + \phi_{i}' + \alpha_{d}\phi_{i+1}' = b\frac{\phi_{i+2} - \phi_{i-2}}{4\Delta\xi} + a\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta\xi}$$
(2.17)

Donde α_d , *a* y *b* son propiedades del esquema, las cuales pueden ser consultadas en Visbal & Gaitonde (2002). ϕ es cualquier cantidad escalar discreta puntual y ϕ' es la derivada espacial de dicha cantidad. Los coeficientes utilizados para la derivación espacial son presentados en la tabla 2.1.

Esquema	$lpha_d$	а	b	Orden de precisión	Fuente
C6	$\frac{1}{3}$	$\frac{14}{9}$	$\frac{1}{9}$	6	Visbal & Gaitonde (2002)

Tabla. 2.1. Coeficientes para el esquema de la derivación espacial

En los puntos en la frontera del dominio también es utilizado el modelo presentado para tal propósito por Visbal & Gaitonde (2002).

$$\phi_1' + \alpha_1 \phi_2' = \frac{1}{\Delta \xi} (a_1 \phi_1 + b_1 \phi_2 + c_1 \phi_3 + d_1 \phi_4 + e_1 \phi_5)$$
(2.18)

Los coeficientes utilizados para la derivación espacial en los puntos en la frontera se presentan en la tabla 2.2.

Debido a que este tipo de esquemas no son difusivos, es necesario el uso de una técnica de filtrado espacial para asegurar su estabilidad (Gaitonde, Shang, & Young, 1999). Para la técnica de filtrado se hace uso del modelo presentado por Visbal & Gaitonde (2002).

$$\alpha_f \hat{\phi}_{i-1} + \hat{\phi}_i + \alpha_f \hat{\phi}_{i+1} = \sum_{n=0}^N \frac{a_n}{2} (\phi_{i+n} + \phi_{i-n})$$
(2.19)

Donde ϕ denota la componente del vector solución y $\hat{\phi}$ denota la componente filtrada. El parámetro α_f es de 0.4 para el presente trabajo. El orden de precisión es degradado en los puntos cercanos a la frontera. Los demás coeficientes, los cuales son obtenidos de Visbal & Gaitonde (2002), son presentados en la tabla 2.3.

Por lo que la herramienta numérica hace uso de esquemas compactos de sexto orden combinado con un filtro de décimo orden.

La integración temporal es realizada por medio de un método de Runge-Kutta explícito de tercer orden.

Esquema	α1	<i>a</i> ₁	b ₁	<i>c</i> ₁	<i>d</i> ₁	<i>e</i> ₁	Orden de precisión	Fuente
C3	2	$-\frac{5}{2}$	2	$\frac{1}{2}$	0	0	3	Gaitonde & Shang (1997)

Tabla. 2.2. Coeficientes para el esquema de la derivación espacial en los puntos de la frontera

Esquema		Coeficientes	Orden de precisión	Fuente	
F10	$ \frac{a_{0}}{193 + 126\alpha_{f}} \\ \frac{193 + 126\alpha_{f}}{256} \\ \frac{a_{3}}{45(1 - 2\alpha_{f})} \\ \frac{512}{512} $	$\frac{a_1}{105 + 302\alpha_f}$ $\frac{105 + 302\alpha_f}{256}$ $\frac{a_4}{5(-1 + 2\alpha_f)}$ $\frac{256}{256}$	$\frac{a_2}{15(-1+2\alpha_f)}$ $\frac{64}{a_5}$ $\frac{1-2\alpha_f}{512}$	10	
F8	$ \frac{\begin{array}{c}a_{0}\\ 93+70\alpha_{f}\\ 128\\ a_{3}\\ \hline \frac{1}{16}-\frac{\alpha_{f}}{8}\end{array}}{aaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaa$	$ \begin{array}{r} a_1 \\ \hline 16 \\ \hline a_4 \\ -\frac{1}{128} + \frac{\alpha_f}{64} \end{array} $	$ \begin{array}{r} a_2 \\ \hline -7 + 14\alpha_f \\ \hline 32 \\ a_5 \\ \hline 0 \end{array} $	8	
F6	$\frac{a_0}{\frac{11}{16} + \frac{5\alpha_f}{8}}$ $\frac{a_3}{\frac{1}{32} - \frac{\alpha_f}{16}}$	$\frac{a_1}{\frac{15}{32} + \frac{17\alpha_f}{16}}$ $\frac{a_4}{0}$	$ \begin{array}{r} a_2 \\ -\frac{3}{16} + \frac{3\alpha_f}{8} \\ a_5 \\ 0 \end{array} $	6	Visbal & Gaitonde (2002)
F4	$ \begin{array}{r} a_0 \\ \overline{5} \\ \overline{8} + \frac{3\alpha_f}{4} \\ \overline{3} \\ 0 \end{array} $	$ \begin{array}{r} a_1 \\ \frac{1}{2} + \alpha_f \\ a_4 \\ 0 \end{array} $	$ \begin{array}{r} a_2 \\ -\frac{1}{8} + \frac{\alpha_f}{4} \\ a_5 \\ 0 \\ \end{array} $	4	
F2	$ \begin{array}{c} a_{0}\\ \frac{1}{2} + \alpha_{f}\\ a_{3}\\ 0 \end{array} $	$ \begin{array}{c} a_1\\ \frac{1}{2} + \alpha_f\\ a_4\\ 0 \end{array} $	a ₂ 0 a ₅ 0	2	

Tabla. 2.3. Coeficientes para el esquema de filtrado

Condiciones iniciales y de frontera

Las condiciones iniciales empleadas son las correspondientes a un ambiente inactivo de aire a presión y temperatura atmosférica.

Las condiciones de frontera utilizadas son las propuestas en Poinsot & Lele (1992). Las condiciones empleadas son: entrada subsónica del fluido en la que las velocidades son fijadas en forma de un perfil "top-hat", en todos los casos de estudio y validación para la entrada del fluido al dominio computacional en el plano de inyección; salida subsónica no reflejante del fluido, en todos los casos de estudio y validación para la salida del fluido del dominio computacional en el plano de inyección; paredes isotérmicas no deslizantes, en todos los casos de estudio en las paredes internas de la cámara perpendiculares al plano de inyección; y paredes adiabáticas no deslizantes, en todos los casos de estudio del inyección de la cámara perpendiculares al plano de inyección; y paredes internas del plano de inyección de la cámara. Para más información consultar Poinsot & Lele (1992) y Jiang & Luo (2000).

Ruido numérico, el cual es generado por medio de la adición de valores dentro de un rango de $\pm 12.5\%$ de la velocidad máxima del perfil inicial de velocidad en la boquilla central, es aplicado a cada una de las componentes de la velocidad en las condiciones de frontera de entrada al dominio computacional para promover la transición del flujo.

Criterio de determinación de estado del flujo

La magnitud de la vorticidad global es monitoreada para el aseguramiento de un flujo estadísticamente estacionario como en Salinas-Vázquez et al. (2010).

$$\omega_{NB}(t) = \frac{\int_{V} \omega_{N}(x, y, z, t) dV}{V_{total}}$$
(2.20)

Donde ω_{NB} es la magnitud de la vorticidad global, ω_N es el módulo de la vorticidad local, dV es un volumen diferencial y V_{total} es el volumen del dominio computacional. ω_N es calculado de acuerdo a las componentes del vector vorticidad.

$$\omega_N(x, y, z, t) = \sqrt{\varpi_x^2(x, y, z, t) + \varpi_y^2(x, y, z, t) + \varpi_z^2(x, y, z, t)}$$
(2.21)

Cuando la magnitud de la vorticidad global se estabiliza alrededor de un valor constante, el flujo es considerado estadísticamente estacionario.

Modelos para cálculo de coeficientes difusivos

Viscosidad dinámica

Es necesario el cálculo de la viscosidad dinámica de cada uno de los componentes de la mezcla para el cálculo de la viscosidad dinámica de la mezcla.

Para el cálculo de la viscosidad dinámica por componente, se hace uso del modelo propuesto por Chung, Ajlan, Lee, & Starling (1988).

$$\mu = (4.0785 \times 10^{-5}) \frac{F_c (MT)^{\frac{1}{2}}}{V_c^{\frac{2}{3}} \Omega^*}$$
(2.22)

En el que μ , Ω^* , V_c , M y T son la viscosidad dinámica, la integral de colisión reducida, el volumen crítico, la masa molecular y la temperatura, respectivamente. El factor F_c es empírico.

$$F_c = 1 - 0.2756\omega + 0.059035I^4 + K$$
(2.23)

Donde I, ω y K, son el momento dipolar adimensional, el factor acéntrico y un factor de corrección, respectivamente. Dicho factor de corrección K es recomendado para algunas sustancias como alcoholes, ácidos y agua. El momento dipolar adimensional Φ está en función del momento dipolar I_x, de la temperatura T, del volumen crítico V_c y de la temperatura crítica T_c.

$$I = \frac{131.3I_x}{(V_c T_c)^{\frac{1}{2}}}$$
(2.24)

La integral de colisión reducida es calculada por medio de la ecuación empírica propuesta por Neufeld, Janzen, & Aziz (1972) la cual es mencionada en Chung et al. (1988).

$$\Omega^* = \frac{A}{T^{*B}} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + GT^{*B}\sin(ST^{*W} - P)$$
(2.25)

Donde A = 1.16145, B = 0.14874, C = 0.52487, D = 0.7732, E = 2.16178, F = 2.43787, $G = -6.435 \times 10^{-4}$, S = 18.0323, W = -0.7683 y P = 7.27371. La temperatura adimensional está en función de la temperatura T y la temperatura crítica T_c .

$$T^* = \frac{1.2593T}{T_c}$$
(2.26)

En el caso del aire, se hace uso de la ley empírica de Sutherland, para mayor información consultar White (1991) y Salinas Vázquez & Métais (2002):

$$\mu(T) = \mu_{ref} \left(T_{ref} \right) \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1 + \frac{S_{v}}{T_{ref}}}{1 + \frac{S_{v}}{T}}$$
(2.27)

En la cual μ , μ_{ref} , s_v , T y T_{ref} son la viscosidad dinámica, la viscosidad dinámica de referencia a una temperatura de referencia, la constante de Sutherland del gas para el cálculo de la viscosidad dinámica, la temperatura y la temperatura de referencia, respectivamente.

El modelo propuesto por Wilke (1950) es usado para el cálculo de la viscosidad dinámica de la mezcla, la cual está en función de la viscosidad dinámica, la masa molecular y la fracción volumétrica de cada uno de los componentes.

$$\mu = \sum_{i=1}^{n} \frac{\mu_{i}}{1 + \frac{1}{c_{i}} \sum_{\substack{j=1 \ j \neq i}}^{j=n} c_{j} \theta_{ij}}}{\left(1 + \left(\frac{\mu_{i}}{\mu_{j}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{j}}{M_{i}}\right)^{\frac{1}{4}}\right)^{2}} \dots}$$
(2.28)
$$\theta_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_{i}}{\mu_{j}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{j}}{M_{i}}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^{2}}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}}\right) \left[1 + \frac{M_{i}}{M_{j}}\right]^{\frac{1}{2}}} \dots$$

Conductividad térmica

Para el cálculo de la conductividad térmica de la mezcla es necesario el cálculo de la conductividad térmica de cada componente.

Para el cálculo de la conductividad térmica por componente, se hace uso del modelo propuesto por Chung et al. (1988).

$$k = \frac{7.452\mu\Psi}{M} \tag{2.30}$$

Donde μ , k y M son la viscosidad dinámica, la conductividad térmica y la masa molecular, respectivamente. La variable Ψ es definida como:

$$\Psi = 1 + \alpha_k \left\{ \frac{\left[0.215 + 0.28288\alpha_k - 1.061\beta + 0.26665Z\right]}{\left[0.6366 + \beta Z + 1.061\alpha_k\beta\right]} \right\}$$
(2.31)

$$\alpha_k = \frac{\bar{C}_v}{R_u} - \frac{3}{2} \tag{2.32}$$

$$\beta = 0.7862 - 0.7109\omega + 1.3168\omega^2 \tag{2.33}$$

$$Z = 2.0 + 10.5T_r^2 \tag{2.34}$$

Donde ω es el factor acéntrico, \overline{C}_v es el calor específico a volumen constante en base molar, R_u es la constante universal de los gases ideales y T_r es la temperatura reducida.

En el caso del aire, al igual que en el cálculo de la viscosidad dinámica, se hace uso de la ley empírica de Sutherland, para mayor información consultar White (1991):

$$k(T) = k_{ref} \left(T_{ref} \right) \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1 + \frac{S_k}{T_{ref}}}{1 + \frac{S_k}{T}}$$
(2.35)

En la cual k, k_{ref} , s_k , T y T_{ref} son la conductividad térmica, la conductividad térmica de referencia a una temperatura de referencia, la constante de Sutherland del gas para el cálculo de la conductividad térmica, la temperatura y la temperatura de referencia, respectivamente.

El modelo propuesto por Mason & Saxena (1958) es usado para el cálculo de la conductividad térmica de la mezcla, la cual está en función de la conductividad térmica, la viscosidad dinámica, la masa molecular y la fracción volumétrica de cada uno de los componentes.

$$k = \sum_{i=1}^{n} k_i \left[1 + \sum_{\substack{j=1\\j \neq i}}^{n} g_{ij} \frac{c_j}{c_i} \right]^{-1}$$
(2.36)

$$g_{ij} = \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_i M_j}{\mu_j M_i} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_i}{M_j} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2$$
(2.37)

Donde se adopta el valor como en Poling, Prausnitz, & O'Connell (2001), $\varepsilon = 1$.

Coeficiente de difusión

El coeficiente de difusión es calculado mediante el modelo propuesto por Fuller, Schettler, & Giddings (1966) para el coeficiente de difusión binario para fase gaseosa.

$$\alpha = \frac{1.0 \times 10^{-3} T^{1.75} \left(\frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b}\right)^{\frac{1}{2}}}{p\left\{ \left(\sum_a v_i\right)^{\frac{1}{3}} + \left(\sum_b v_i\right)^{\frac{1}{3}} \right\}}$$
(2.38)

Donde α es el coeficiente de difusión binaria, p es la presión, T es la temperatura, $M_{a,b}$ son las masas moleculares de cada uno de los gases. Los volúmenes de difusión atómica v_i se obtienen por medio de los datos expuestos en Fuller, Ensley, & Giddings (1969) y son presentados en la tabla 2.4.

Volúmenes de difusión $(cm^3), \sum v_i's$				
CH ₄	25.14			
<i>CO</i> ₂	26.7			
02	16.3			
Aire	19.7			

Tabla. 2.4. Volúmenes de difusión del metano, dióxido de carbono, oxígeno diatómico y aire, datos obtenidos y calculados de Fuller et al. (1969)

3. Validación de la Herramienta Numérica

En esta sección, la validación de la herramienta numérica es presentada. La herramienta numérica es validada con el fin de comprobar su capacidad de simular los casos de estudio deseados.

El caso de validación es seleccionado debido a la configuración del caso. La configuración del caso de validación considera un chorro de diferente densidad emitido a un medio inactivo el cual recibe influencia de una corriente externa de la misma densidad del medio y del confinamiento. Mientras que en los casos de estudio, aire es inyectado por medio del chorro central en un medio inactivo de aire, formando una corriente que ejerce una influencia sobre cuatro chorros anulares de metano. Existiendo, tanto en el caso de validación como en el caso de estudio, la influencia de una corriente de diferente densidad y el efecto del confinamiento sobre los chorros.

Caso de validación

Para el caso de validación, el caso de un chorro densidad variable es seleccionado. Donde el chorro de dióxido de carbono y una corriente de aire paralela al chorro (coflujo) son inyectados en una cámara con aire con dimensiones como las que se explican en los siguientes párrafos.

En la figura 3.1 se aprecia el dominio computacional con las siguientes dimensiones $26D_b \times 11D_b \times 11D_b$, a lo largo de la dirección longitudinal y de las direcciones transversales, respectivamente. La configuración de una distancia longitudinal menor que la establecida en los casos experimentales es debida al tiempo de cómputo.

La simulación numérica es realizada considerando una malla de $240 \times 189 \times 189$ nodos. La malla es refinada en la región de la boquilla, como se puede apreciar en la figura 3.2.

Considerando que la boquilla central emite dióxido de carbono y que el fluido de la corriente paralela, así como el de la cámara, es aire. Las relaciones de velocidad y de densidad se muestran en la tabla 3.1.



Fig. 3.1. Visualización del plano de inyección y la cámara de sección transversal cuadrada



Fig. 3.2. Visualización de la malla tridimensional de 240x189x189 nodos de los distintos casos de simulación



Tabla. 3.1. Parámetros adimensionales del caso de validación de un chorro con densidad variable

Donde u_{rel} y ρ_{rel} son las relaciones de velocidad de inyección y de densidad, respectivamente. Las cuales están en relación con la velocidad del coflujo de aire u_e , la velocidad de inyección del dióxido de carbono u_b , la densidad del aire ρ_e y la densidad del dióxido de carbono ρ_b .

Los parámetros adimensionales para esta simulación, los cuales son definidos en la sección anterior, se presentan en la tabla 3.2.

Número de	Número de Prandtl	Número de	Relación de calores
Reynolds	Pr	Schmidt	específicos
Re		Sc	γ
32000.0	0.74	0.52	1.29

Tabla. 3.2. Parámetros adimensionales del caso de validación de un chorro con densidad variable

Los resultados obtenidos son comparados con los datos experimentales de Amielh et al. (1996) y Djeridane et al. (1996), así como con las funciones analíticas de Chen & Rodi (1980) expuestas en Wang et al. (2008) las cuales se presentan a continuación.

$$\frac{u_c}{u_b} = 6.3 \left(\frac{\rho_b}{\rho_e}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{D_b}{x}\right)$$
(3.1)

$$\frac{fm_c}{fm_b} = 5.4 \left(\frac{\rho_b}{\rho_e}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{D_b}{x}\right)$$
(3.2)

Donde ρ es la densidad, u es la componente longitudinal del vector velocidad, D_b es el diámetro interno de la boquilla, fm es la fracción másica y x es la distancia longitudinal. Mientras que los subíndices "b", "c" y "e" están relacionados al flujo en la boquilla, al flujo en la línea central del chorro y al flujo del coflujo externo, respectivamente.

Comparación de resultados

El análisis estadístico se realizó a partir de 100 tiempos adimensionales de acuerdo al monitoreo de la magnitud de la vorticidad global, desde donde dicha magnitud se estabiliza alrededor de un valor constante como se puede apreciar en la figura 3.3.



Fig. 3.3. Magnitud de la vorticidad global adimensional del caso de validación

La componente longitudinal de la velocidad promedio y la fracción másica promedio a lo largo del eje del chorro mantiene la tendencia del decaimiento en comparación con los trabajos experimentales y la función analítica de Chen & Rodi (1980), lo cual se puede apreciar en las figuras 3.4 y 3.5. Los valores del presente trabajo son ajustados dos diámetros adimensionales debido a que el flujo no transiciona naturalmente y se hace uso de ruido numérico para promover la transición. El desajuste final es debido a falta de tiempo de cómputo y, por lo tanto, de convergencia estadística. Sin embargo mantiene la tendencia con respecto a la curva analítica y a la curva experimental.



Fig. 3.4. Componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro



Fig. 3.5. Fracción másica promedio a lo largo del eje del chorro

La amplitud media de la componente longitudinal de la velocidad promedio es expuesta en la figura 3.6. Esta propiedad del flujo es comparada con datos experimentales y con la función presentada por Amielh et al. (1996), la cual se presenta a continuación:

$$\frac{L_u}{D_b} = 0.057 \left(\frac{x}{D_b} + 2.0\right)$$
(3.3)

Para los fines de la simulación, L_u es considerada como la distancia radial con respecto al eje del chorro en la que $U - U_e = 0.5(U_c - U_e)$ como en Wang et al. (2008).

La pendiente de la línea es lo importante en el análisis de la amplitud media de la componente longitudinal de la velocidad promedio. La comparación de las pendientes entre el trabajo experimental y la simulación del presente trabajo es mostrada en la tabla 3.3.

	Amielh et al. (1996)	Presente trabajo
Pendiente de la recta	0.057	0.055

Tabla. 3.3. Comparación de pendientes de la recta entre el trabajo experimental y la simulación del presente trabajo



Fig. 3.6. Amplitud media de la componente longitudinal de la velocidad promedio del chorro

Como fue mencionado en capítulos anteriores, el perfil de velocidad promedio de un chorro sencillo libre se hace auto-semejantes más allá de la región de desarrollo del flujo, donde los perfiles radiales de velocidad promedio colapsan en una misma curva (Pope, 2000). Mientras que en los chorros de densidad variable, existe una auto-semejanza aproximada tanto en el perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio como en el perfil radial de fracción másica, la cual es conocida como pseudo-semejanza (Wang et al., 2008). Para una discusión más completa consultar Wang et al. (2008) y Chen & Rodi (1980).

La pseudo-semejanza es reportada en los trabajos experimentales de Amielh et al. (1996) y Djeridane et al. (1996) aproximadamente a $15 x/D_b$ para ambos perfiles. Debido a las condiciones iniciales, la distancia longitudinal a la que se presenta este fenómeno varía con respecto a la simulación. Sin embargo, el fenómeno también se presenta a partir de tal distancia longitudinal de $x/D_b = 15$ en la presente validación. En este caso, de forma análoga a L_u , L_{fm} como la distancia radial con respecto al eje del chorro en la que $fm - fm_e = 0.5(fm_c - fm_e)$. Dichos perfiles, tanto de la componente longitudinal de la velocidad promedio como de fracción másica promedio, empatan con los resultados experimentales como se muestra en las figuras 3.7 y 3.8.


Fig. 3.7. Perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio pseudo-semejante



Fig. 3.8. Perfil radial de fracción másica promedio pseudo-semejante

La evolución de las fluctuaciones RMS y de la energía cinética turbulenta con respecto al eje del chorro son evaluadas. Como se muestra en las figuras 3.9, 3.10 y 3.11, con respecto al trabajo experimental, la simulación numérica conserva la tendencia y el orden de magnitud en las distintas curvas con pequeños desajustes debido a la falta de tiempo de cómputo, y por lo tanto, de convergencia estadística. Éstas representan la intensidad de la turbulencia, y se definen como se muestra en las ecuaciones 3.4, 3.5, 3.6 y 3.7. Para mayor información consultar White (1991).

$$u_{rms} = \left(\overline{u'u'}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.4}$$

$$v_{rms} = \left(\overline{v'v'}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.5}$$

$$w_{rms} = \left(\overline{w'w'}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.6}$$

$$K = \frac{1}{2} \left(\overline{u'u'} + \overline{v'v'} + \overline{w'w'} \right)$$
(3.7)

Donde K es la energía cinética turbulenta. Mientras que u', v' y w' son las fluctuaciones de las componentes del vector velocidad.



Fig. 3.9. Fluctuaciones RMS de la componente longitudinal de la velocidad a lo largo del eje del chorro



Fig. 3.10. Fluctuaciones RMS de la componente radial de la velocidad a lo largo del eje del chorro



Fig. 3.11. Energía cinética turbulenta a lo largo del eje del chorro

Por otra parte, la evaluación de las fluctuaciones RMS, de la energía cinética turbulenta y el esfuerzo de Reynolds son realizadas radialmente también. Esta evaluación es realizada en el trabajo experimental a 15 diámetros adimensionales en la dirección longitudinal con respecto al plano de inyección, donde reportan la pseudo-semejanza de los perfiles tanto de la componente longitudinal de la velocidad promedio como de fracción másica promedio. Debido a que dicha pseudo-semejanza también se presenta a partir de tal distancia longitudinal en la presente validación, la evaluación radial de estas propiedades del flujo es realizada a la misma distancia. Por lo que los perfiles radiales expuestos en las figuras 3.12, 3.13, 3.14 y 3.15 son analizados a 15 diámetros adimensionales en la dirección longitudinal con respecto al plano de inyección en el presente trabajo de validación, mismo comportamiento se presenta en distancias posteriores.

En el caso de los esfuerzos de Reynolds es evidente el desajuste en ciertos puntos de la curva. Estos desajustes son debido a falta de tiempo de cómputo y, por lo tanto, de convergencia estadística. Sin embargo, la tendencia y el orden de magnitud son muy parecidos y aproximados a los datos experimentales.



Fig. 3.12. Perfil radial de las fluctuaciones RMS de la componente longitudinal de la velocidad



Fig. 3.13. Perfil radial de las fluctuaciones RMS de la componente radial de la velocidad



Fig. 3.14. Perfil radial de la energía cinética turbulenta



Fig. 3.15. Perfil radial del esfuerzo de Reynolds

A partir de los resultados mostrados se observa que la herramienta numérica representa correctamente el caso de validación, el cual consiste en un chorro redondo de densidad variable débilmente confinado. Dicho fenómeno físico, como es explicado al inicio del capítulo, cumple características aproximadas a los casos de estudio que se presentan en los siguientes capítulos. Por lo que la herramienta numérica es capaz de simular satisfactoriamente los casos de estudio.

4. Configuración del sistema y casos de estudio

En la presente sección, la configuración del sistema es detallada. Esta configuración corresponde a un quemador de llama difusiva inversa propuesto por un grupo de investigadores del Instituto de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México, de la Escuela Superior de Ingeniería Mecánica Eléctrica y del Instituto Mexicano del Petróleo. Posteriormente, los casos de estudio son planteados y expuestos. Y finalmente, los resultados y la discusión de los mismos son presentados.

Configuración del sistema

Por parte de del grupo de investigadores que participan en el proyecto se propuso un quemador de llama difusiva inversa que consta de una boquilla central por la que se inyectará el oxidante y cuatro boquillas anulares por medio de las cuales se inyectará el combustible, donde cada una de las boquillas anulares tiene el mismo diámetro entre sí, como el que se muestra en el esquema de la figura 4.1.



Fig. 4.1. Configuración del quemador del presente trabajo

La relación entre el diámetro de la boquilla central y el diámetro de las boquillas anulares está dada de la siguiente forma:

$$r_D = \frac{D_a}{D_b} \approx 0.35 \tag{4.1}$$

Donde D_a , D_b y r_D son el diámetro de cualquiera de las boquillas anulares, el diámetro de la boquilla central y la relación de diámetros, respectivamente.

Se considera como longitud de referencia el diámetro de la boquilla del chorro central. La distancia entre centros de la boquilla central con cada una de las boquillas anulares es de aproximadamente 2 diámetros adimensionales.

$$P_c \approx 2D_b \tag{4.2}$$

En la figura 4.2 se aprecia el dominio computacional con las siguientes dimensiones $12D_b \times 6.75D_b \times 6.75D_b$, a lo largo de la dirección longitudinal y de las direcciones transversales respectivamente.

$$L_t \approx 6.75 D_b \tag{4.3}$$

$$L_l \approx 12D_b \tag{4.4}$$



Fig. 4.2. Configuración del sistema del presente estudio

Casos de estudio

Los casos de estudio se establecen de acuerdo a la relación de equivalencia primaria, la cual es considerada como en Barakat et al. (2013):

$$\Phi = \frac{(A/F)_{est}}{(A/F)_{real}}$$
(4.5)

Donde Φ es la relación de equivalencia primaria, $(A/F)_{est}$ es la relación aire-combustible estequiométrica y $(A/F)_{real}$ es la relación aire-combustible real.

Considerando que el combustible inyectado por medio de las boquillas anulares es metano y que el oxidante inyectado por medio de la boquilla central es aire, a condiciones atmosféricas ambos, en una cámara con un ambiente inactivo de aire. Los casos de simulación se muestran en la tabla 4.1.

Casos	Relación de equivalencia primaria Ф	Relación de velocidad $u_{rel} = \frac{u_{comb}}{u_{aire}}$	Relación de densidad $\rho_{rel} = \frac{\rho_{comb}}{\rho_{aire}}$	
1	1.25	1.28		20% de defecto de aire
2	1.11	1.13	-	10% de defecto de aire
3	1.0	1.02	0.55	Estequiométrico
4	0.91	0.93		10% de exceso de aire
5	0.83	0.85		20% de exceso de aire

Tabla. 4.1. Casos de simulación

Donde u_{rel} y ρ_{rel} son las relaciones de velocidad de inyección y de densidad, respectivamente, las cuales están en relación con la velocidad de inyección del combustible u_{comb} , la velocidad de inyección del aire u_{aire} , la densidad del combustible a condiciones atmosféricas ρ_{comb} y la densidad del aire a condiciones atmosféricas ρ_{aire} . Estas relaciones de velocidad y densidad son las necesarias para llevar acabo los casos de simulación de acuerdo a la relación de equivalencia primaria y al defecto o exceso de aire.

Cada una de las simulaciones numéricas es realizada considerando una malla de $186 \times 189 \times 189$ nodos en las direcciones x, y y z, respectivamente. La malla es refinada en las regiones de la boquilla central y las boquillas anulares, como se muestra en la figura 4.3. Respetando las longitudes adimensionales mencionadas anteriormente. La malla es uniforme y el tamaño de celda es de 0.076 diámetros adimensionales en la dirección longitudinal. Mientras que en las direcciones transversales, la malla no es uniforme y el tamaño de la celda más grande es de 0.052 diametros adimensionales y el tamaño de la celda más pequeña es de 0.024 diámetros adimensionales.

Los parámetros adimensionales para esta simulación, los cuales son definidos en la sección anterior, se presentan en la tabla 4.2.



Fig. 4.3. Visualización de la malla tridimensional de 186x189x189 nodos de los distintos casos de simulación

Número de	Número de Prandtl	Número de	Relación de calores
Reynolds	Pr	Schmidt	específicos
Re		Sc	γ
10800.0	0.71	0.74	1.4
			• • •

Tabla. 4.2. Parámetros adimensionales empleados en la simulación

Análisis de independencia de malla

El análisis de independencia de malla es realizado con tres mallas diferentes, incluyendo la utilizada para los casos de estudio. Donde los subíndices "*a*", "*b*", "*c*" y "*ca*" están relacionados al flujo en cada una de las boquillas anulares, al flujo en la boquilla central, al flujo en la línea central del chorro central y al flujo en la línea central de un chorro anular, respectivamente.

El decaimiento de la componente longitudinal de la velocidad promedio es presentado en la figura 4.4, donde se puede observar que las tres mallas muestran resultados muy parecidos. Conservando la misma tendencia. Esto es a causa de que la zona correspondiente al chorro central requiere menor resolución debido al diámetro del chorro central.

Sin embargo, tanto el decaimiento de la componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro anular como la fracción volumétrica promedio a lo largo del eje del chorro anular muestran comportamientos diferentes en las simulaciones realizadas con cada malla, como se puede observar en las figuras 4.5 y 4.6. Esto es a causa de que dichas zonas correspondientes a cada uno de los chorros anulares requieren mayor resolución debido al menor diámetro de cada uno de los chorros y a los gradientes más significativos que se

presentan en cada uno de los chorros. En consecuencia, la malla más refinada es la seleccionada para llevar acabo los casos de estudio.



Fig. 4.4. Componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro central



Fig. 4.5. Componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro anular



Fig. 4.6. Fracción volumétrica promedio a lo largo del eje del chorro anular

5. Resultados de los casos de estudio

El análisis estadístico se realizó a partir de 200 tiempos adimensionales de acuerdo al monitoreo de la magnitud de la vorticidad global, desde donde dicha magnitud se estabiliza alrededor de un valor constante como se puede apreciar en la figura 5.1.



Fig. 5.1. Magnitud de la vorticidad global adimensional de los casos de estudio

Análisis del flujo

El decaimiento de la componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro central de cada uno de los casos es presentado en la figura 5.2, donde la longitud del núcleo potencial de cada caso de simulación es apreciable. Considerando que el núcleo potencial es la región donde la velocidad de inyección se mantiene casi constante, la longitud del núcleo potencial se extiende hasta aproximadamente a $x/D_b = 4$ para todos los casos de simulación. El subíndice "*c*" está relacionado con la línea central o eje del chorro central.

La longitud del núcleo potencial del chorro central no varía significativamente entre los casos de simulación, debido a la zona de estudio considerada en el dominio computacional donde los efectos inerciales predominan. La influencia ejercida por los chorros anulares sobre la longitud del núcleo potencial del chorro central es mínima, debido al flujo de cantidad de movimiento de cada uno de los chorros, donde el flujo de cantidad de movimiento de cada uno de los chorros que el flujo de cantidad de movimiento del chorro central. Esto a causa de su menor área de inyección, a la menor densidad del fluido inyectado por medio de ellos y a su velocidad de inyección.

La energía cinética turbulenta a lo largo del eje del chorro central es presentada en la fig. 5.3, la cual es definida en el tercer capítulo, donde es apreciable que los distintos casos de simulación incrementan sus niveles de energía cinética turbulenta a una distancia aproximadamente igual. El incremento en los niveles de energía cinética turbulenta es atribuido tanto a la interacción de los chorros anulares con el chorro central como a la tasa de decaimiento del chorro central.

Las pequeñas variaciones entre cada uno de los casos, tanto en la longitud del núcleo potencial como en los niveles de energía cinética turbulenta, es atribuida al intercambio de cantidad de movimiento entre los chorros anulares y el chorro central, debido a la interacción entre ellos, lo cual está relacionado a lo mencionado en Manohar et al. (2004).



Fig. 5.2. Componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro central



Fig. 5.3. Energía cinética turbulenta a lo largo del eje del chorro central

La componente longitudinal de la velocidad promedio y la fracción volumétrica promedio a lo largo del eje del chorro anular de cada uno de los casos son presentadas en las figura 5.4

y 5.5, donde se puede observar que la longitud del núcleo potencial de cada caso es diferente. El subíndice "ca" está relacionado con la línea central o eje del chorro anular.

Las inestabilidades en los chorros de combustible se incrementan más rápido a medida que son inyectados a una mayor velocidad, por causa de poseer una densidad menor que la del fluido del medio (Fiedler, Lummer, & Nottmeyer, 1993). Lo cual es respaldado con el incremento de la energía cinética turbulenta a lo largo del eje del chorro anular de cada caso de estudio, mostrado en la figura 5.6. Donde se puede observar que la magnitud del incremento y la distancia donde este sucede, con respecto al plano de inyección, están directamente relacionadas con la velocidad de inyección de los chorros anulares y a la tasa de decaimiento de la velocidad de inyección es superior. Por lo tanto, la longitud del núcleo potencial es menor conforme la velocidad de inyección de los chorros anulares es mayor, debido al incremento más rápido de las inestabilidades que dan lugar tanto a la formación de vórtices que promueven la transferencia de masa y cantidad de movimiento, de acuerdo a los casos de estudio (Barakat et al., 2013).

Por otro lado, el incremento de la energía cinética turbulenta a lo largo del eje del chorro anular es mínimo para el caso con la velocidad de inyección de los chorros anulares más baja, correspondiente al caso con 20% de exceso de aire. Por lo que se atribuye la longitud del núcleo potencial de este caso a su baja velocidad de inyección. Esto debido a su bajo flujo de cantidad de movimiento para penetrar en el ambiente y alcanzar la estabilidad suficiente para tener el patrón de los demás casos de estudio.



Fig. 5.4. Componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro anular



Fig. 5.5. Fracción volumétrica promedio a lo largo del eje del chorro anular



Fig. 5.6. Energía cinética turbulenta a lo largo del eje del chorro anular

Perfiles radiales – Paralelo a la sección longitudinal

Los perfiles radiales de la componente longitudinal de la velocidad promedio son evaluados a lo largo del eje longitudinal, considerando el plano paralelo a cualquier sección longitudinal y que coincide con el eje del chorro central, como se ejemplifica en la figura 5.7. Aquí se presenta el contorno de la componente longitudinal de la velocidad promedio sobre dicho plano.

La figura 5.8 presenta la evolución del perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio a diferentes distancias con respecto al plano de inyección, sobre el plano mencionado, donde en $r/D_b = 0$ es el eje del chorro central, mientras que en $r/D_b \approx 2$ es el eje del chorro anular y $r/D_b \approx 3.375$ es la pared.

El perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio conserva aproximadamente su forma inicial a una distancia cercana al plano de inyección.

Posteriormente, esta componente de la velocidad promedio disminuye conforme la distancia longitudinal con respecto al plano de inyección aumenta, tanto en la región del chorro central como en la región de los chorros anulares. Esto es debido a los efectos viscosos, los cuales causan el arrastre de los chorros sobre el medio y el cual está relacionado con el proceso de mezclado (Kundu & Cohen, 2002; Ball et al., 2012). Mientras que las componentes radiales de la velocidad promedio de los chorros incrementan, causando la amplificación de los chorros (Pope, 2000).

La componente longitudinal de la velocidad promedio en la región del chorro anular disminuye más rápido que en la región del chorro central, a pesar de ser inyectados a una velocidad mayor que el chorro central para algunos casos de simulación. Esto es debido al flujo de cantidad de movimiento de cada uno de los chorros, así como a la relación de densidad entre el combustible y el fluido del medio. Como se mencionó en el análisis del decaimiento de esta componente a lo largo del eje de cada chorro, correspondiente a las figuras 5.2 y 5.4.

Consecuentemente, la interacción entre el chorro central con los chorros anulares tiene lugar, causando la formación de la capa límite interior (Barakat et al., 2013). En la sección final de la cámara, la formación de un perfil parecido al de un chorro sencillo tiene lugar para todos los casos de estudio, lo cual está relacionado a lo mencionado en Raghunathan & Reid (1981).

Además, velocidades negativas son observadas tanto en la región cercana al plano de inyección como en la sección final de la cámara en la zona cercana a la pared. Estas velocidades negativas están relacionadas con patrones de recirculación, los cuales son explicados más adelante.



Fig. 5.7. Plano para la evaluación del perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio del caso con 20% de defecto de aire paralelo a la sección longitudinal



Fig. 5.8. Perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio

Por otra parte, la fracción volumétrica promedio es evaluada en el mismo plano y se presenta en la figura 5.9. Donde se puede observar la evolución del perfil radial de fracción volumétrica promedio a diferentes distancias con respecto al plano de inyección.

En las inmediaciones al plano de inyección, todos los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio son muy similares debido a que el perfil radial inicial de fracción volumétrica es igual para todos los casos de estudio y, como se explicó anteriormente, a que el perfil radial inicial de la componente longitudinal de la velocidad se conserva aproximadamente en esta región. Las pequeñas variaciones son debidas a los patrones de recirculación en la región próxima al plano de inyección, así como a la tasa de decaimiento del chorro. Por lo que el caso con 20% de defecto de aire presenta concentraciones cercanas a la región del chorro central en las inmediaciones al plano de inyección, debido al combustible transportado por la dispersión de los chorros y los patrones de recirculación. La

formación de la capa límite exterior tiene lugar desde el momento de la emisión de los chorros de combustible (Barakat et al., 2013).

Posteriormente, la presencia de concentraciones de combustible en la capa cortante del chorro central y, consecuentemente, la formación de la capa límite interior tienen lugar en todos los casos de estudio. Esto es debido a la influencia del arrastre del chorro central sobre los chorros de combustible, así como a la dispersión de los chorros, conforme el flujo se mueve en la dirección longitudinal (Barakat et al., 2013). Por lo tanto, la formación de la capa límite exterior tiene lugar antes que la formación de la capa límite interior. La presencia de concentraciones de combustible hasta el eje del chorro central es debido a la interacción entre los chorros de combustible con el chorro central, así como a las fluctuaciones presentes en el chorro central.

Los perfiles radiales de fracción volumétrica empatan entre los distintos casos en la sección final de la cámara, debido a su relación con los perfiles radiales de la componente longitudinal de la velocidad promedio.

Los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio de los distintos casos empatan aparentemente. Sin embargo, las pequeñas diferencias en la fracción volumétrica tienen gran relevancia para determinar si la fracción volumétrica está dentro de los límites de inflamabilidad y, por lo tanto, si pertenecen a la región inflamable del flujo; lo cual se aborda más adelante.





Fig. 5.9. Perfil radial de fracción volumétrica promedio

Los perfiles radiales de energía cinética turbulenta son evaluados a lo largo del eje longitudinal considerando el mismo plano, como se muestra en la figura 5.10. Donde en la región próxima al plano de inyección, los niveles de energía cinética turbulenta de los chorros de combustible son mayores en comparación con los niveles del chorro de aire, debido a que estos se desarrollan más rápido por causa tanto de su flujo de cantidad de movimiento como de la influencia de la densidad del fluido del medio. Esto es respaldado con lo mostrado anteriormente en las figuras 5.3 y 5.6.

Los mayores niveles de energía cinética en las inmediaciones del plano de inyección son apreciables para el caso con 20% de defecto de aire. Inicialmente, los mayores niveles de energía cinética turbulenta están presentes en la región de la capa cortante de todos los chorros para los distintos casos de estudio. Esto debido a que en esta región comienzan a presentarse las inestabilidades que posteriormente dan lugar a la formación de la turbulencia, así como el proceso de mezclado.

Posteriormente, los niveles de energía cinética turbulenta en la región de los chorros de combustible disminuyen debido a la tasa de decaimiento de estos, mientras que el chorro central continúa dispersándose. Causando que los niveles de energía cinética turbulenta se distribuyan a lo largo de la dirección radial de este plano en la sección final de la cámara. Los mayores niveles de energía cinética turbulenta se concentran en las zonas ubicadas entre el chorro central y los chorros anulares, debido a la forma del perfil de velocidad promedio en dicha zona.



Fig. 5.10. Perfil radial de la energía cinética turbulenta

Perfiles radiales – A 45° de la sección longitudinal

Los perfiles radiales de la componente longitudinal de la velocidad promedio son evaluados a lo largo del eje longitudinal, considerando el plano ubicado a 45° de cualquiera de las secciones longitudinales y que coincide con el eje del chorro central, como se ejemplifica en la figura 5.11. Aquí se presenta el contorno de la componente longitudinal de la velocidad promedio sobre dicho plano. Este plano no cuenta con la presencia directa de los chorros anulares, dado que el plano está ubicado entre dos de los chorros anulares.

La figura 5.12 presenta la evolución del perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio a diferentes distancias con respecto al plano de inyección, sobre el plano mencionado a 45° de cualquier sección longitudinal de todos los casos de estudio, donde en $r/D_b = 0$ es el eje del chorro central.

La componente longitudinal de la velocidad promedio sobre este plano aparentemente es muy similar al de un chorro sencillo. Sin embargo, la influencia del confinamiento y de los chorros anulares se puede observar en la presencia de las velocidades negativas adyacentes al chorro central. Estas velocidades negativas son debidas a las recirculaciones que alimentan tanto al chorro central como a los chorros adyacentes a cada recirculación, las cuales se explicarán más adelante.



Fig. 5.11. Plano para la evaluación del perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio del caso con 20% de defecto de aire a 45° de la sección longitudinal





Fig. 5.12. Perfil radial de la componente longitudinal de la velocidad promedio a 45° de la sección longitudinal

Igualmente, los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio son evaluados sobre el mismo plano. Las figura 5.13 presenta la evolución del perfil radial de fracción volumétrica promedio a diferentes distancias con respecto al plano de inyección.

A pesar de no tener la presencia de los chorros de combustible, concentraciones de combustible son identificadas. La presencia de concentraciones de combustible existe conforme el flujo se mueve en la dirección longitudinal. La presencia de dichas concentraciones puede atribuirse a la influencia del arrastre del chorro central, a la dispersión radial de los chorros y a la existencia del patrón de recirculación en esta región del flujo.

En las inmediaciones del plano de inyección, la presencia de concentraciones de combustible se pueden observar en los casos con una velocidad de inyección de los chorros anulares mayor que la velocidad de inyección del chorro central. Esto debido al patrón de circulación más intenso y a la relevancia de las componentes radiales por causa del incremento de las inestabilidades de los chorros de combustible, como se explicó anteriormente al analizar el decaimiento de la componente longitudinal de la velocidad promedio. Asimismo, la presencia de combustible en la línea central del chorro central es debido a las fluctuaciones presentes en el chorro central.



Fig. 5.13. Perfil radial de fracción volumétrica promedio a 45° de la sección longitudinal

De la misma manera, los perfiles radiales de energía cinética turbulenta son evaluados en el mismo plano, donde en la región inicial, como es esperado, el caso con 20% de defecto de aire muestra los mayores niveles de energía cinética turbulenta, debido a la intensidad de las inestabilidades.

Sin embargo, a medida que el flujo se desarrolla alcanzan niveles y distribución radial de energía cinética turbulenta muy similares en comparación con los demás casos de estudio, esto es debido a que la influencia de los chorros anulares en esta región es muy similar, puesto que la intensificación del proceso de mezclado de los chorros anulares tiene lugar en la sección inicial de la cámara, como se explicó anteriormente en análisis de la energía cinética turbulenta sobre el eje de los chorros anulares. También se puede observar que el perfil de energía cinética turbulenta en este plano se distribuye radialmente conforme el chorro se dispersa, a medida que el chorro se mueve en la dirección longitudinal.



Fig. 5.14. Perfil radial de la energía cinética turbulenta a 45° de la sección longitudinal

Los campos de presión y temperatura presentan pequeñas variaciones dentro de un margen de $\pm 3.75\%$ en todos los casos de estudio. Sin embargo, estas variaciones no son consideradas significativas a condiciones atmosféricas, por lo que el proceso es considerado isobárico e isotérmico.

Patrones de recirculación

La presencia de recirculaciones para alimentar el arrastre de los chorros tiene lugar en diversas regiones de la cámara, lo cual está relacionado con lo mencionado por Hussein et al. (1994). Las características de estos patrones de recirculación están relacionados con las condiciones del flujo, lo cual tiene relación con lo descrito en Barchilon & Curtet (1964).

Para todos los casos de estudio, los patrones de recirculación están ubicados más allá del núcleo potencial de los chorros de combustible en la región entre cada uno de los chorros anulares y la pared, como se ejemplifica en las figuras 5.12 y 5.13. Estas recirculaciones son identificadas sobre un plano paralelo a la sección longitudinal como el mostrado en la figura 5.7. Estas recirculaciones alimentan el arrastre del chorro central debido a la ausencia de fluido circundante, lo cual está relacionado a lo mencionado en Kandakure et al. (2008).

Además, estos patrones de recirculación están relacionados con la velocidad de inyección de los chorros anulares en estos casos de estudio. Puesto que estos patrones de recirculación están más distantes al plano de inyección, para aquellos casos en que la velocidad de inyección del combustible es mayor que la velocidad de inyección del oxidante.



Fig. 5.15. Líneas de trayectoria del caso con 20% de defecto de aire en el plano paralelo a la sección longitudinal



Fig. 5.16. Líneas de trayectoria del caso con 20% de exceso de aire en el plano paralelo a la sección longitudinal

Además, la presencia de patrones de recirculación tiene lugar en las zonas ejemplificadas en la figura 5.17. Estas zonas están ubicadas entre cada uno de los chorros anulares y las paredes del confinamiento. Estas recirculaciones son identificadas sobre un plano a 45° de la sección longitudinal como el mostrado en la figura 5.11, y se pueden apreciar en las figuras 5.18 y 5.19. Estas recirculaciones tienen lugar en dichas zonas debido a la ausencia de los chorros anulares. Como puede apreciarse, los patrones de recirculación están ubicados tanto en las inmediaciones del plano de inyección como en la región más alla de la recirculación ubicada en las inmediaciones del plano de inyección.

El patron de recirculación, ubicado en la inmediación del plano de inyección, alimenta el arrastre tanto del chorro central como de cada uno de los chorros adyacentes a la recirculación. Y su amplitud está relacionada con la velocidad de inyección de los chorros anulares. Presentándose las recirculaciones con mayor amplitud para los casos con mayores velocidades de inyección de los chorros de combustible.

Por otro lado, el patrón de recirculación que se presenta más alla de las inmediaciones del plano de inyección está presente hasta la sección final de la cámara, y alimenta el arrastre del chorro central.



Fig. 5.17. Esquema de las zonas de los patrones de recirculación ubicados entre cada uno de los chorros anulares y las paredes del confinamiento



Fig. 5.18. Líneas de trayectoria del caso con 20% de defecto de aire en el plano ubicado a 45° de la sección longitudinal



Fig. 5.19. Líneas de trayectoria del caso con 20% de exceso de aire en el plano ubicado a 45° de la sección longitudinal

Regiones inflamables

Debido a la recomendación mencionada en la introducción del presente trabajo, el rango más amplio delimitado por los límites inflamabilidad es seleccionado por cuestión de seguridad. De acuerdo a Zabetakis (1965), el límite inferior de inflamabilidad y el límite superior de inflamabilidad considerados para el análisis son de 5% y 15%, respectivamente.

Inicialmente, la región inflamable es formada dentro de la región de la capa límite exterior en todos los casos. Posteriormente, la dispersión de los chorros causa la interacción entre los chorros anulares y el chorro central. Debido a dicha interacción y a la dispersión de los chorros, las concentraciones de combustible se distribuyen radialmente. Sin embargo, dicha distribución radial de concentraciones de combustible no está dentro de los límites de inflamabilidad completamente y, por lo tanto, no todas pertenecen a la región inflamable. El desarrollo de los perfiles radiales de fracción volumétrica a lo largo del eje longitudinal de cada uno de los casos es expuesto en las figuras 5.20, 5.21, 5.22, 5.23 y 5.24. La región inflamable, la cual se encuentra dentro de los límites de inflamabilidad, es marcada en cada uno de los casos. Como se puede observar, la región inflamable se encuentra dentro de la capa cortante de los chorros anulares, antes de la sección final de la cámara.

La distribución radial de la región inflamable, tanto para los casos con defecto de aire como para el caso estequiométrico, es mayor en la sección final de la cámara. Mientras que en los casos con defecto de aire, la distribución radial de la región inflamable es menor. Donde a pesar de tener presencia de concentraciones de combustible en las direcciones radiales, dichas concentraciones no están dentro de los límites de inflamabilidad. Esto se atribuye a la intensidad de las inestabilidades de los chorros de combustible, las cuales están relacionadas con su velocidad de inyección e intensifican el proceso de mezclado, como se mencionó en el análisis de la componente longitudinal de la velocidad promedio a lo largo del eje del chorro anular.

Por lo que es recomendable que el inicio del proceso de combustión tenga lugar en la sección final de la cámara. Esto debido a que la región inflamable es más amplia en dicha sección, en comparación con la sección más cercana al plano de inyección donde la región inflamable está ubicada en la capa cortante de cada uno de los chorros anulares.



a) Plano paralelo a la sección longitudinal Fig. 5.20. Desarrollo de los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio del caso con 20% de defecto de aire



a) Plano paralelo a la sección longitudinal Fig. 5.21. Desarrollo de los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio del caso con 10% de defecto de aire



a) Plano paralelo a la sección longitudinal b) Plano a 45° de la sección longitudinal Fig. 5.22. Desarrollo de los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio del caso estequiométrico



a) Plano paralelo a la sección longitudinal Fig. 5.23. Desarrollo de los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio del caso con 10% de exceso de aire



a) Plano paralelo a la sección longitudinal b) Plano a 45° de la sección longitudinal Fig. 5.24. Desarrollo de los perfiles radiales de fracción volumétrica promedio del caso con 20% de exceso de aire

La visualización de iso-superficies de fracción volumétrica asiste en la identificación de la región inflamable en cada uno de los casos. El límite inferior de inflamabilidad está marcado por medio de la iso-superficie de color azul, mientras que el límite superior de inflamabilidad está marcado por medio de la iso-superficie de color negro. Por lo que ambas iso-superficies forman las fronteras dentro de las cuales está definida la región inflamable. Éstas se pueden observar en las figuras 5.25, 5.26, 5.27, 5.28 y 5.29, correspondientes a cada caso de simulación.

De acuerdo a lo presentado en los perfiles de fracción volumétrica promedio y a lo que muestran las visualizaciones, una mayor distribución radial de la región inflamable en la sección final de la cámara es confirmada para los casos con defecto de aire.

Como se puede observar, la región inflamable está presente a una distancia menor con respecto al plano de inyección, para los casos con mayor velocidad de inyección de los chorros anulares. Esto corresponde a los casos con defecto de aire y al caso estequiométrico, y se atribuye a la intensidad de la recirculación cercana al plano de inyección. Esta recirculación arrastra fluido con concentraciones de metano. Por lo que la región inflamable tiene mayor presencia en la dirección longitudinal para los casos con defecto de aire.

Además, el caso con 20% de defecto de aire presenta concentraciones de combustible que otorgan menor incertidumbre de estar dentro de los límites de inflamabilidad, en la sección final de la cámara. Este caso de estudio presenta una región inflamable más distribuida en la sección final de la cámara, tanto longitudinalmente como radialmente. Aumentando la probabilidad de que el proceso de combustión pueda llevarse a cabo en esta zona y promoviendo el aprovechamiento de combustible.



Fig. 5.25. Vista lateral de iso-superficies de fracción volumétrica del caso con 20% de defecto de aire



Fig. 5.26. Vista lateral de iso-superficies de fracción volumétrica del caso con 10% de defecto de aire



Fig. 5.27. Vista lateral de iso-superficies de fracción volumétrica del caso estequiométrico



Fig. 5.28. Vista lateral de iso-superficies de fracción volumétrica del caso con 10% de exceso de aire



Fig. 5.29. Vista lateral de iso-superficies de fracción volumétrica del caso con 20% de exceso de aire

6. Conclusiones

El proceso de mezclado en un quemador de llama difusiva inversa con boquillas organizadas circunferencialmente ha sido estudiado mediante la simulación de grandes escalas. La relación de equivalencia primaria varía en un rango de 0.83 a 1.25 por medio de la relación de velocidad entre el chorro central y los chorros anulares.

La validación de la herramienta numérica utilizada para el análisis de los casos de estudio ha sido realizada con la simulación de un caso de un chorro de densidad variable débilmente confinado de dióxido de carbono inyectado en un ambiente inactivo de aire con la presencia de un coflujo. Los resultados de la validación en comparación con los datos experimentales y funciones analíticas están dentro del orden de magnitud y cumplen la tendencia. La herramienta numérica es considerada capaz de simular fenómenos como el caso de validación y los casos de estudio.

La longitud del núcleo potencial del chorro central no varía significativamente entre cada uno de los casos de estudio. Esto debido a que su velocidad de inyección no varía entre cada uno de los casos, a la poca influencia de los chorros anulares debido a la relación de densidades y a la región de estudio donde los efectos inerciales prevalecen en el flujo.

Por otro lado, la longitud del núcleo potencial de cada uno de los chorros anulares está relacionada con su velocidad de inyección y es influida por la relación de densidades. Aumentando la longitud del núcleo potencial en cada uno de los chorros anulares conforme la velocidad de inyección es menor, debido a la disminución en la intensidad de las inestabilidades, las cuales promueven el proceso de mezclado. Para el caso en el que la velocidad de inyección es lo suficientemente baja para que la intensidad de las inestabilidades no tenga relevancia, como en el caso con 20% de exceso de aire, la longitud del núcleo potencial disminuye debido a su bajo flujo de cantidad de movimiento.

Patrones de recirculación son identificados, los cuales están ubicados en la región entre la pared y cada uno de los chorros anulares, con el fin de alimentar el arrastre tanto del chorro central como de los chorros anulares. Las características de estos patrones de recirculación están relacionadas con la velocidad de inyección de los chorros anulares en estos casos de estudio. El flujo es considerado isotérmico e isobárico debido a que las variaciones tanto en el campo de presión como en el campo de temperatura no son significativas.

La región inflamable es determinada por medio de la fracción volumétrica promedio y los límites de inflamabilidad del combustible. Existiendo relación entre la localización de dicha región con la relación de velocidades entre los chorros de combustible y el chorro del oxidante. Los casos con defecto de aire presentan una mayor distribución radial de la región inflamable en la sección final de la cámara.

En particular, el caso con 20% de defecto de aire es el más recomendado debido a la distribución de su región inflamable. La cual se distribuye mejor en la sección final de la cámara, tanto longitudinalmente como radialmente, en comparación con los demás casos de estudio. Además de presentar concentraciones de combustible que otorgan menor incertidumbre de estar dentro los límites de inflamabilidad en la sección final de la cámara, lo cual no sucede en los demás casos de estudio.

Como trabajos futuros, se pretende la implementación de modelos de programación y uso de plataformas de cómputo en paralelo para disminuir el tiempo de cómputo de la herramienta numérica y evitar la falta de convergencia estadística. Lo que también permitiría el uso de mallas con un mayor número de celdas (o densidad de nodos), aumentando la exactitud del cálculo. De igual forma, está considerada la implementación de modelos para desarrollar el estudio reactivo del sistema. Además, sería conveniente el estudio de la influencia de la geometría del confinamiento en el flujo y en las regiones inflamables, con el fin de distribuir mejor dicha región.
Bibliografía

- Amielh, M., Djeridane, T., Anselmet, F., & Fulachier, L. (1996). Velocity near-field of variable density turbulent jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(10), 2149-2164.
- Ayech, S., Habli, S., Saïd, N., Bournot, H., & Le Palec, G. (2014). Effect of the coflow stream on a plane wall jet. *Heat and Mass Transfer*, *50*(12), 1685-1697.
- Ball, C. G., Fellouah, H., & Pollard, A. (2012). The flow field in turbulent round free jets. *Progress in Aerospace Sciences*, 50, 1-26.
- Barakat, H. Z., Kamal, M. M., Saad, H. E., & Eldeeb, W. A. (2014). Performance enhancement of inverse diffusion flame burners with distributed ports. *Proceedings* of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy, 229(2), 160-175.
- Barakat, H. Z., Salem, M. R., Morgan, A., & Saad, H. E. (2013). Study of effects of burner configuration and jet dynamics on characteristics of inversed diffusion flames. *Journal of Mechanical Engineering Research*, 5(7), 128-144.
- Barchilon, M., & Curtet, R. (1964). Some Details of the Structure of an Axisymmetric Confined Jet With Backflow. *Journal of Basic Engineering*, 86(4), 777-787.
- Chen, C. J., & Rodi, W. (1980). Vertical Turbulent Buoyant Jets—A Review of Experimental Data. The Science and Application of Heat and Mass Transfer. New York: Pergamon Press.
- Chung, T. H., Ajlan, M., Lee, L. L., & Starling, K. E. (1988). Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27(4), 671-679.
- Coward, H. F., & Jones, G. W. (1952). *Limits of Flammability of Gases and Vapors*. U.S. Department of the Interior, Bureau of Mines. Washington D.C., United States of America: U.S. Bureau of Mines. Bulletin 503.
- Dimotakis, P. E. (2000). The mixing transition in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 409, 69-98.
- Djeridane, T., Amielh, M., Anselmet, F., & Fulachier, L. (1996). Velocity turbulence properties in the near-field region of axisymmetric variable density jets. *Physics of Fluids*, 8(6), 1614-1630.

- Ducros, F., Comte, P., & Lesieur, M. (1996). Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *Journal of Fluid Mechanics*, 326, 1-36.
- Egerton, A., & Powling, J. (1948). The Limits of Flame Propagation at Atmospheric Pressure. I. The Influence of 'Promoters'. *Proc. R. Soc. Lond. A*, *193*(1033), 172-190.
- El-Mahallawy, F., & El-Din Habik, S. (2002). *Fundamentals and Technology of Combustion* (1 ed.). Oxford, United Kingdom: Elsevier Science Ltd.
- Fiedler, H. E., Lummer, M., & Nottmeyer, K. (1993). Plane Mixing Layer Between Parallel Streams of Different Velocities and Different Densities. *Advances in Turbulence Studies*. (H. Branover, & Y. Unger, Eds.) American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc. Series on Progress in Astronautics and Aeronautics. (A. R. Seebass, Chief Ed.).
- Fuller, E. N., Ensley, K., & Giddings, J. C. (1969). Diffusion of halogenated hydrocarbons in helium. The effect of structure on collision cross sections. *The Journal of Physical Chemistry*, 73(11), 3679-3685.
- Fuller, E. N., Schettler, P. D., & Giddings, J. C. (1966). A NEW METHOD FOR PREDICTION OF BINARY GAS - PHASE DIFFUSION COEFFICIENTS. Industrial and Engineering Chemistry, 58(5), 18-27.
- Gaitonde, D. V., Shang, J. S., & Young, J. L. (1999). PRACTICAL ASPECTS OF HIGHER-ORDER NUMERICAL SCHEMES FOR WAVE PROPAGATION PHENOMENA. *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING*, 45(12), 1849-1869.
- Gaitonde, D., & Shang, J. S. (1997). Optimized Compact-Difference-Based Finite-Volume Schemes for Linear Wave Phenomena. *Journal of Computational Physics*, 138(2), 617–643.
- Hussein, H. J., Capp, S. P., & George, W. K. (1994). Velocity measurements in a high-Reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 258, 31-75.
- Jiang, X., & Luo, K. H. (2000). Direct Numerical Simulation of the Puffing Phenomenon of an Axisymmetric Thermal Plume. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 14(1), 55-74.
- Kandakure, M. T., Patkar, V. C., & Patwardhan, A. W. (2008). Characteristics of turbulent confined jets. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47(8), 1234-1245.

- Keating, E. L. (1993). *Applied combustion*. New York, United States of America: MARCEL DEKKER, INC.
- Komiyama, M., Fujimura, T., Takagi, T., & Kinoshita, S. (2005). Dynamic behavior of diffusion flame interacting with a large-scale vortex by laser imaging techniques. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1), 465-473.
- Kundu, P. K., & Cohen, I. M. (2002). *Fluid Mechanics* (2 ed.). San Diego, California, United States of America: Academic Press/Elsevier Science.
- Manohar, C. I., Sundararajan, T., Ramjee, V., & Kumar, S. S. (2004). A numerical and experimental investigation of the interactions between a non-uniform planar array of incompressible free jets. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 44(4), 431-446.
- Mason, E. A., & Saxena, S. C. (1958). Approximate Formula for the Thermal Conductivity of Gas Mixtures. *The Physics of Fluids*, 1(5), 361-369.
- McAllister, S., Chen, J.-Y., & Fernandez-Pello, A. C. (2011). *Fundamentals of Combustion Processes.* (F. F. Ling, Ed.) New York: Springer Science+Business Media.
- Neufeld, P. D., Janzen, A. R., & Aziz, R. A. (1972). Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals Ω(l,s)* for the LennardJones (12–6) Potential. *The Journal of Chemical Physics*, 57(3), 1100-1102.
- Poinsot, T. J., & Lele, S. K. (1992). Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 101(1), 104-129.
- Poling, B. E., Prausnitz, J. M., & O'Connell, J. P. (2001). THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS (5 ed.). New York, United States of America: The McGraw-Hill Companies, Inc.
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- Raghunathan, S., & Reid, I. M. (1981). A Study of Multiple Jets. AIAA Journal, 19(1), 124-127.
- Riahi, Z., Mergheni, M. A., Sautet, J.-C., & Ben Nasrallah, S. (2013). NUMERICAL STUDY OF TURBULENT NORMAL DIFFUSION FLAME CH4-AIR STABILIZED BY COAXIAL BURNER. *THERMAL SCIENCE*, 17(4), 1207-1219.
- Salinas Vázquez, M., & Métais, O. (2002). Large-eddy simulation of the turbulent flow through a heated square duct. *Journal of Fluid Mechanics*, 453, 201-238.

- Salinas-Vázquez, M., Vicente, W., González-Rodríguez, C., Barrios-Bonilla, E., & Espinosa-Gayosso, A. (2010). Large Eddy Simulation of a jet flow with a suction/ejection system using immersed boundary conditions. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 98(10-11), 618-627.
- Sirisawat, S., & Patvichaichod, S. (2012). Learning Equipment for the Flammability Limits of Liquefied Petroleum Gas. *American Journal of Applied Sciences*, 9(8), 1316-1320.
- Sze, L. K. (2006). THERMAL AND EMISSION CHARACTERISTICS OF AN INVERSE DIFFUSION FLAME WITH CIRCUMFERENTIALLY ARRANGED FUEL PORTS. *PhD Thesis*. Hong Kong: The Hong Kong Polytechnic University.
- Sze, L. K., Cheung, C. S., & Leung, C. W. (2006). Appearance, temperature, and NOx emission of two inverse diffusion flames with different port design. *Combustion and Flame*, 144(1), 237-248.
- Visbal, M. R., & Gaitonde, D. V. (2002). On the Use of Higher-Order Finite-Difference Schemes on Curvilinear and Deforming Meshes. *Journal of Computational Physics*, 181(1), 155-185.
- Wang, P., Fröhlich, J., Michelassi, V., & Rodi, W. (2008). Large-eddy simulation of variabledensity turbulent axisymmetric jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29(3), 654-664.
- Warnatz, J., Maas, U., & Dibble, R. W. (2006). Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation (4 ed.). Berlin: Springer.
- White, F. M. (1991). *Viscous Fluid Flow* (2 ed.). New York, United States of America: McGraw-Hill, Inc.
- Wilke, C. R. (1950). A Viscosity Equation for Gas Mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 18(4), 517-519.
- Zabetakis, M. G. (1965). Flammability characteristics of combustible gases and vapors. U.S. Department of the Interior, Bureau of Mines. Washington D.C., United States of America: U.S. Bureau of Mines. Bulletin 627.
- Zhiyin, Y. (2015). Large-eddy simulation: Past, present and the future. *Chinese Journal of Aeronautics*, 28(1), 11-24.