

Extinción de una llama de premezcla en canales estrechos con y sin recirculación de calor



UNIVERSIDAD CARLOS III

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y DE FLUIDOS

ÁREA DE MECÁNICA DE FLUIDOS

PROYECTO FIN DE CARRERA

Autor: **Miguel Almodóvar Carvajal**

Tutor: **Mario Sánchez Sanz**

Resumen

El avance experimentado en los últimos años en campos como las técnicas de fabricación y los materiales ha hecho que se abran barreras y surjan nuevas oportunidades en el mundo de la micro-generación de potencia. Este es un campo muy novedoso en el que la mayoría de sus aplicaciones se encuentran aún en la fase de viabilidad.

A modo de introducción, en este proyecto se explica de dónde surge la necesidad de tener sistemas productores de potencia en muy pequeña escala, incluyendo una pequeña descripción de las cuestiones fluidotérmicas, físicas y químicas que lleva consigo implícita la reducción en la escala, donde el comportamiento difiere considerablemente en comparación con sistemas más grandes. Dentro de esta introducción estarán incluidas algunas de las posibles aplicaciones que puede tener la generación de potencia en pequeña escala. Después de la introducción, este proyecto se centrará en estudiar cómo afecta la reducción en la escala a la combustión en canales estrechos. Primero se estudiará el efecto que provocan las pérdidas de calor a través de las paredes en los límites de flamabilidad en un canal donde se permite la transferencia de calor al exterior por una de sus paredes, observando que incluso bajas pérdidas de calor llegan a producir la extinción completa de la llama según se reduce la longitud característica. Después basándose en el combustor Swiss-roll desarrollado por primera vez por Lloyd y Weinberg [Ref. 3] se contrarrestarán estas pérdidas de calor circulando un gas en contracorriente de manera que precaliente la mezcla fría a la entrada, provocando una disminución notable en las pérdidas de calor. Para realizar este estudio se utilizará un modelo simplificado y no se pretende analizar de manera exhaustiva la dinámica de la combustión, que resulta ser muy compleja, sino determinar los parámetros que afectan en mayor medida a la existencia de una llama en un canal estrecho y qué circunstancias la pueden llevar a su extinción. Se comprobará que existen valores limitantes en la escala a partir de los cuales la combustión no se puede sostener, incluso incrementando la entalpía de la mezcla entrante por medio de la recirculación de calor como se mencionaba antes. A pesar de que siempre existirá un límite en la escala, se verá que gracias a este método se alcanzan temperaturas superiores a la temperatura adiabática de llama y que se logra mantener la combustión para escalas mucho menores que en un solo canal sin recirculación.

Para la realización del estudio se ha desarrollado un código en lenguaje Fortran donde se resuelven de forma numérica las ecuaciones que rigen una llama pobre de premezcla. Se empieza resolviendo el caso más sencillo, que es un solo canal con pérdidas, donde se analizan los efectos que producen las pérdidas de calor a través de las paredes conjuntamente con la reducción en la escala a la existencia de la llama. Posteriormente se resuelve el caso donde un gas que circula en contracorriente calienta la mezcla entrante y se analiza en función de distintos parámetros geométricos y fluidotérmicos la existencia de llama según se reduce la escala, hasta llegar a la extinción completa. Este análisis se realiza mediante un método de continuación.

Finalmente se comparan ambos casos y se concluye que la recirculación de calor extiende en gran parte la existencia de combustión cuando se reduce la escala del problema.

Por último, con el objetivo de optimizar el tiempo de cálculo y el coste computacional, en el apéndice se propone realizar una transformación de coordenadas, donde se aumenta la resolución en los alrededores de la llama.

Contenido

Índice de figuras.....	4
Nomenclatura y abreviaciones.....	5
Capítulo 1	7
Introducción	7
1.1. Motivación	7
1.2. Objetivos	7
Capítulo 2	8
Generación de potencia usando micro combustión.....	8
2.1. Introducción	8
2.2. Principios fluidotérmicos	9
2.2.1. Micro-escala	9
2.2.2. Fluidos.....	10
2.3. Transferencia de calor	11
2.3.1. Combustión	12
2.4. Generación de potencia en micro-escala usando combustión. Aplicaciones.....	14
2.4.1. Introducción.....	14
2.4.2. Microcombustores y reactores	14
2.4.3. Turbinas de gas y motores de combustión interna	15
2.4.4. Microcohetes	16
Capítulo 3	17
Combustión en canales estrechos sin recirculación de calor	17
3.1. Introducción	17
3.2. Dominio.....	18
3.3. Hipótesis del modelo	18
3.4. Formulación.....	19
3.5. Resolución del problema numéricamente	20
3.5.1. Discretización.....	20
3.5.1.1. Dominio	21
3.5.1.2. Ecuaciones que gobiernan el problema	22
3.5.1.3. Condiciones de contorno.....	23
3.5.1.4. Resolución de los sistemas de ecuaciones lineales	24

3.6. Resultados.....	25
Capítulo 4	28
Combustión en canales estrechos con recirculación de calor.....	28
4.1. Introducción	28
4.2. Dominio.....	28
4.3. Hipótesis del modelo	29
4.4. Formulación.....	29
4.5. Resolución del problema numéricamente	30
4.5.1. Introducción.....	30
4.5.2. Discretización.....	30
4.5.2.1. Dominio	31
4.5.2.2. Ecuaciones que gobiernan el problema	32
4.5.2.3. Condiciones de contorno.....	33
4.5.3. Difusión numérica.....	34
4.5.4. Formación de los sistemas de ecuaciones lineales	36
4.5.5. Resolución de los sistemas de ecuaciones lineales.....	38
4.6. Temperatura y extensión de la llama	40
Capítulo 5	46
Extinción de la llama en canales estrechos.....	46
5.1. Introducción	46
5.2. Procedimiento. Método de continuación de <i>Euler-Newton</i>	46
5.3. Resultados.....	49
Capítulo 6	52
Conclusiones.....	52
6. Conclusiones.....	52
Apéndice A	54
Transformación de las ecuaciones.....	54
Introducción	54
Refinado de la malla en torno a un punto interior x_c	55
Apéndice B.....	60
Bibliografía	61

Índice de figuras

Figura 1:.....	13
Figura 2:.....	14
Figura 3:.....	19
Figura 4:.....	22
Figura 5:.....	22
Figura 6:.....	24
Figura 7:.....	26
Figura 8:.....	26
Figura 9:.....	26
Figura 10:.....	27
Figura 11:.....	28
Figura 12:.....	31
Figura 13:.....	32
Figura 14:.....	36
Figura 15:.....	38
Figura 16:.....	39
Figura 17:.....	40
Figura 18:.....	41
Figura 19:.....	41
Figura 20:.....	42
Figura 21:.....	43
Figura 22:.....	44
Figura 23:.....	44
Figura 24:.....	45
Figura 25:.....	49
Figura 26:.....	50
Figura 27:.....	50
Figura 28:.....	56
Figura 29:.....	57
Figura 30:.....	58
Figura 31:.....	59
Figura 32:.....	59

Nomenclatura y abreviaciones

D_{T_1}	Difusividad térmica
Δx_f	Extensión de la llama
h_1	altura en el canal 1
h_2	Altura en el canal 2
h_{21}	Relación de alturas, h_2/h_1
L_c	Longitud crítica
S_L	Velocidad de propagación de una llama plana
T_0	temperatura inicial del fluido
T_1	Temperatura 1
T_2	Temperatura 2
T_e	Temperatura adiabática de llama, $T_e = T_0 + QY_0/c_p$
U_L	Velocidad de propagación de una llama plana para $\beta \rightarrow \infty$
U_f	Velocidad de propagación dimensional
Y_0	Fracción másica inicial del combustible
Y_F	Fracción másica del combustible
\tilde{b}	Coefficiente genérico de transmisión de calor
b_c	Coefficiente de transmisión de calor crítico
c_p	Capacidad calorífica
m_1	velocidad máxima del fluido 1
m_2	velocidad máxima del fluido 2
m_{21}	Relación de velocidades, m_2/m_1
u_f	Velocidad de propagación de la llama
u_p	Factor, $u_p = S_L/U_L$
x'	Coordenada axial
x_c	Zona de máximo estrechamiento
x_f	Posición de la llama en el eje x
y_1	Coordenada transversal adimensional en canal 1, $y_1 = y_1'/h_1$
y_1'	coordenada transversal en el canal 1
y_2	Coordenada transversal adimensional en canal 2, $y_2 = y_2'/h_2$
y_2'	Coordenada transversal
δ_T	espesor de la llama
$\theta_{1,\infty}$	Perfil de temperatura 1 en $x \rightarrow \infty$
θ_1	Temperatura adimensional 1, $\theta_1 = (T_1 - T_0)/(T_e - T_0)$
$\theta_{2,-\infty}$	Perfil de temperatura 2 en $x \rightarrow -\infty$
θ_2	Temperatura adimensional 2, $\theta_2 = (T_2 - T_0)/(T_e - T_0)$
ω_0	Velocidad de reacción, $\omega_0 = \beta^2 Y / (2Leu_p) \exp(\beta(\theta_1 - 1)/(1 + \gamma(\theta_1 - 1)))$
Δx	Distancia entre nodos en la dirección axial, $\Delta x = x_{i+1} - x_i$
Δy	Distancia entre nodos en la dirección transversal, $\Delta y = y_{1j+1} - y_{1j}$
D	Difusividad másica
L	Longitud de la zona donde se permite intercambio de calor
Le	Número de Lewis $Le = D/D_{T_1}$
M	Flujo másico $M = 4\rho m_1 h_1/3$
Pe	Número de Peclet, $Pe = m_1 h_1/D_{T_1}$
Q	Calor liberado por unidad de masa de combustible quemado
T	temperatura

Y	Fracción másica escalada, Y_F/Y_0
b	Coefficiente de transmisión de calor, $b = \tilde{b}D_{T_1}/S_L$
d	Número de <i>Damköhler</i> , $d = [h_1/(D_{T_1}/S_L)]^2$
n	Distancia normal a la superficie
u	Velocidad adimensional en la dirección axial $u = [1 - (y_1'/h_1)^2]$
x	Coordenada axial adimensional, $x = x'/(Pe h_1)$
β	Número de Z'eldovich, $\beta = E(T_e - T_0)/(R_g T_e)$
γ	Parámetro de liberación de calor, $\gamma = (T_e - T_0)/T_e$
ε	Error entre iteración e iteración
ρ	Densidad
τ	Coefficiente de estrechamiento

Subíndice

c	crítico
i	Contador para la dirección axial
j	Contador para la dirección transversal
max	máximo
min	mínimo
n	Contador genérico

Superíndice

m	Iteración m
–	En la transformación de coordenadas designa a la malla computacional

Abreviaciones

EDM	Electro-dischargemachining
FIBM	Focus ion beammachining
LBM	Laser beammachining
MEMS	Microelectricomechanicalsystems

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Recientemente se ha experimentado una tendencia al alza en la miniaturización de dispositivos mecánicos y electromecánicos, lo cual es un resultado de los avances y mejoras en las técnicas de micro fabricación. Gracias a diversas y modernas técnicas es posible la fabricación de alta precisión de sistemas del orden de centímetros e incluso del de milímetros. Este avance en las técnicas de fabricación abre excitantes y nuevos retos en el campo de la combustión, como es la posibilidad de generar potencia en escalas pequeñas, lo cual tendría muchas aplicaciones debido a la creciente necesidad de dispositivos de alta energía específica, aprovechando la alta densidad de energía de un hidrocarburo frente a una batería convencional. Con esto en mente, se están desarrollando dispositivos generadores de potencia en escalas pequeñas donde la termodinámica de los fluidos y la resistencia de los materiales ofrecen comportamientos diferentes a los conocidos en sistemas más grandes. El efecto principal que produce la reducción en la escala es el aumento en las pérdidas de calor a través de las paredes, lo cual lleva a la extinción de la llama, inestabilidades y una reducción en las eficiencias térmicas. Se han propuesto diferentes métodos para superar el efecto adverso que produce la reducción en la escala. Este proyecto se va centrar en estudiar la combustión en canales estrechos y en cómo afecta la recirculación del calor de los gases de escape a la extinción de la llama.

1.2. Objetivos

El objetivo de este proyecto es estudiar por medio de simulaciones numéricas los distintos parámetros que afectan a la extinción de una llama pobre de premezcla en canales estrechos. Además se estudiará como afrontar el aumento en las pérdidas de calor debido a la disminución en la escala hasta el punto de llegarse a la extinción completa de la llama. Las distintas simulaciones numéricas se han realizado programando en *Fortran*, lenguaje de alto nivel de propósito general, que aunque posee una sintaxis considerada algo arcaica, sigue siendo el lenguaje preferente a la hora de desempeñar tareas de computación numérica de alto rendimiento.

Debido al alto coste computacional que requiere el cálculo de sistemas de ecuaciones acoplados simultáneos, se han tomado medidas para reducir el número de nodos dentro de la malla computacional manteniendo el nivel de precisión. Realizar una transformación de coordenadas para refinar en el dominio físico las zonas donde existen mayores gradientes, en nuestro caso, en la localización de la llama, manteniendo una malla computacional uniforme, y evitar de esta manera la inclusión de nodos adicionales como sería el caso de utilizar una malla física uniforme. Asimismo, para calcular los límites de extinción de la llama, se deben resolver los sistema de ecuaciones acoplados un número muy alto de veces para determinar si existe o no combustión en función de una serie de parámetros, lo cual sería inviable de no afrontarse debidamente. Para ahorrar tiempo de cálculo, se ha utilizado un método de continuación de *Newton* para interpolar el siguiente valor en la gráfica y reducir al mínimo el número de soluciones a resolver.

Capítulo 2

Generación de potencia usando microcombustión

2.1. Introducción

En los últimos años se ha experimentado una tendencia al alza en la miniaturización de dispositivos tanto mecánicos como electromecánicos, lo cual continúa aquella iniciada en áreas como la microelectrónica, biomecánica o la biología molecular, y que en gran parte es el resultado de los progresos y avances conseguidos en las técnicas de micro fabricación. La fabricación de alta precisión de dispositivos en una escala del orden centímetros se consigue gracias a técnicas como *EDM*, *LBM* y *FIBM*. Para fabricar en una escala del orden de milímetros se recurre a técnicas como *MEMS*, *rapid prototyping* y *batch manufacturing*. El interés en producir dispositivos mecánicos miniaturizados abre excitantes y nuevas oportunidades para la combustión, especialmente en el campo de la generación de potencia en la pequeña escala, debido a la necesidad de dispositivos que nos proporcionen potencia con alta energía específica (pequeño tamaño, bajo peso, larga duración).

Los dispositivos electrónicos portátiles que utiliza el consumidor típicamente sufren de ciclos cortos de operación entre recargas o reemplazo de la batería, y su peso total consiste en gran parte en el peso de la batería. También dispositivos mecánicos en miniatura, como pueden ser microrobots, microaviones o *microrovers* están limitados por el peso de los sistemas de potencia disponibles. La necesidad de reducir el peso del sistema, aumentar el tiempo de operación y reducir el coste por unidad ha provocado la aparición de un nuevo campo, el de la generación de potencia en pequeña escala o microgeneración de potencia.

El concepto detrás de este nuevo campo es poder utilizar la alta energía específica que contienen los combustibles fósiles en estado líquido en micro-dispositivos para generar potencia mediante combustión. La ventaja potencial se puede apreciar comparando a modo de ejemplo la alta energía específica de un hidrocarburo (típicamente 45 MJ/kg) con la densidad de energía de una batería de litio, de 1.2 MJ/kg (la mitad si se trata de una batería alcalina). Además del interés en la miniaturización, en este campo existe también el potencial de fabricar dispositivos usando técnicas como MEMS o rapid prototyping, lo que conlleva producción en masa y bajo coste de producción. Por supuesto hay que tener en consideración todo lo que conlleva la combustión desde el punto de vista medioambiental. Las emisiones de CO₂, H₂O y de calor por parte de esos micro dispositivos son significativamente inferiores a aquellas emitidas por los seres humanos. Sin embargo se espera que la eficiencia de la combustión en micro dispositivos sea menor que aquella en dispositivos más grandes, además de una comparativamente mayor producción de hidrocarburos inquemados y CO. Por otra parte las baterías tienen sus propios problemas medioambientales, y tanto su producción como su eliminación conllevan un peligro de cara al medioambiente.

Los dispositivos generadores de potencia presentados en este trabajo son aquellos cuyo objetivo es una producción de potencia en un rango desde unos pocos vatios a milivatios. No hay que confundir por tanto con las llamadas microturbinas, pues estas generan una potencia del orden de kilovatios. En este caso no hay que tomar el término micro en sentido literal, sino como una comparación con las turbinas más grandes. La generación de potencia del orden de vatios tiene múltiples aplicaciones, tales como dispositivos electrónicos (ordenadores portátiles, teléfonos móviles, etc.) y sistemas mecánicos miniaturizados (pequeños robots, aviones, rovers, etc.). Los correspondientes dispositivos para llevar a cabo la

combustión tienen un tamaño del orden de 1 cm (conocido como mesoescala), y sus técnicas de microfabricación son relativamente convencionales (EDM), y en algunos casos con componentes MEMS. La generación de potencia del orden de milivatios (microescala) encuentra sus aplicaciones principalmente en los componentes microelectrónicos (sensores, transmisores, etc.), con el objetivo final de incorporar el dispositivo generador de potencia en el componente microelectrónico. Estos dispositivos generadores de potencia son construidos principalmente usando MEMS. Hay que hacer hincapié en que el objetivo final es tener "generación de potencia en un chip".

El campo de la generación de micropotencias joven (4-6 años), ya que el interés por esta materia surgió debido a las recientes mejoras y avances en las técnicas de fabricación para miniaturizar dispositivos mecánicos, y está aún, en la mayoría de los casos, en la fase de viabilidad. Sin embargo, considerando que es un nuevo horizonte de desarrollo tecnológico, y que pocos proyectos se han subvencionado hasta la fecha, se puede decir que se ha producido un progreso significativo y esperanzador. Muchos microcombustores que se han fabricado parecen operar con buena eficiencia. Algunos de estos combustores se han utilizado para proveer de energía a sistemas termoeléctricos para producir potencia. La eficiencia de estos sistemas es por el momento muy baja, pero la limitación parece encontrarse en los componentes termoeléctricos, y no en el proceso de combustión. También se han desarrollado una serie de turbinas y motores, algunos de ellos consiguiendo producir potencia positiva, pero como en el caso anterior con eficiencias muy baja. Aquí el problema parece encontrarse en la fabricación y en la gestión térmica, que o limita las tolerancias en las partes móviles, o causa una reducción en la eficiencia de los componentes de forma individual (compresor, cámara de combustión). También se están desarrollando células de combustible. Cabe mencionar por último que la combustión en pequeña escala tiene otras aplicaciones prácticas aparte de la generación de potencia y producción de calor. Posicionar calor de forma localizada es una de estas potenciales aplicaciones. Otro ejemplo interesante es el uso de una colección de quemadores del orden de la mesoescala para producir una combustión de forma distribuida en los combustores contenidos en turbinas de gas de gran escala, lo cual tiene el potencial de recalentar entre turbinas, y para combustiones de premezcla o con gran concentración de contaminantes, reducir el NO_x .

2.2. Principios fluidotérmicos

2.2.1. Micro-escala

La longitud característica de los microcombustores que se han desarrollado hasta la fecha, incluso en sistemas con un tamaño del orden de MEMS, es suficientemente mayor que la media de la distancia libre molecular del aire y otros gases que fluyen a través de sistemas donde el comportamiento físico-químico de los fluidos es fundamentalmente el mismo que en sus sistemas homólogos en macro-escala. Por esto, las hipótesis estándar de los termofluidos tales como la condición de no deslizamiento y la continuidad del medio son todavía aplicables. No obstante el pequeño tamaño de los microdispositivos o de sus componentes provoca unas características particulares en la mecánica de fluidos, transferencia de calor, y la combustión asociada a la operación del sistema.

La longitud característica de los componentes en grandes sistemas productores de potencia es grande, y generalmente los números de Peclet y de Reynolds son también grandes. De esta forma los flujos serán mayoritariamente turbulentos, ya que los efectos viscosos y

difusivos serán pequeños en comparación con los efectos convectivos. Las condiciones de contorno dan información sobre los efectos de las paredes, y generalmente tendrán poca influencia en el sistema en general.

Mientras se va reduciendo el tamaño de los dispositivos, el carácter de las ecuaciones que gobiernan el fluido y la importancia de los distintos términos irán cambiando. Mientras la longitud característica del sistema se reduce, los números de Peclet y Reynolds disminuyen y el flujo tiende a ser menos turbulento, de forma que los efectos viscosos y el transporte difusivo de masa y calor tienen cada vez más importancia. Mirando desde el punto de vista de la combustión, una cuestión importante es la magnitud del tiempo de residencia, ya que este disminuye con la longitud del quemador, y ha de ser mayor que el tiempo químico para que ocurra la combustión completa.

Para microdispositivos (del orden de MEMS) con longitudes características muy pequeñas, y por ello números de Peclet y de Reynolds pequeños, el flujo es mayoritariamente laminar. Los términos difusivos se vuelven muy importantes y los efectos convectivos son despreciables. En este caso, al tiempo característico se le refiere como tiempo de difusión. Puesto que el mezclado debido a la turbulencia es pequeño, las especies se mezclarán principalmente por difusión. Por esto, el tiempo de difusión es importante, ya que debe ser menor que el tiempo de residencia para que ocurra el mezclado completo

2.2.2. Fluidos

El pequeño diámetro de los canales tanto a la entrada de la mezcla reactante como en el escape de los productos y en la cámara de combustión limita los flujos en microdispositivos a números de Reynolds relativamente pequeños. Debido a esto, el flujo será principalmente laminar en pequeños dispositivos y como consecuencia tendremos que el mezclado de las diferentes especies se hará mayoritariamente por medio de difusión. Además, como se ha mencionado antes, los efectos viscosos serán importantes, lo que junto con el alto ratio superficie-volumen que se encuentra en microcanales implica que las pérdidas por fricción serán altas y se necesitará un mayor bombeo. Por otra parte, las fuerzas viscosas ayudan en algunos de los problemas característicos de este tipo de dispositivos, tales como pérdidas debido al filtrado de gases a través de las uniones o de las superficies móviles. Esto podría ser importante en los motores de combustión interna, ya que su eficiencia está íntimamente ligada a la relación de compresión, lo que será afectado por el filtrado en el pistón (rotor)/superficies de la carcasa.

Como ocurre con sus homólogos en gran escala, los microcombustores deben usar aire del ambiente como fuente de oxígeno para reducir su volumen y mantener su límite de funcionamiento en densidad de energía. Esto implica que el hidrocarburo en estado líquido ha de ser evaporado y mezclado con el aire antes de entrar en la cámara de combustión en sistemas de premezcla o inyectado directamente en la cámara de combustión en otros sistemas. Debido a que nos encontramos en pequeña escala en lo referente a longitudes, esto tiene un gran impacto en los requerimientos de dinámica y energía asociados a los flujos con cambio de fase. Hay estudios donde se ha observado, por ejemplo, que el cambio de fase de líquido a vapor en canales del tamaño de MEMS ocurre de manera abrupta e inestable, bastante diferente de la transición observada en tubos largos. Esto se debe parcialmente al gran ratio superficie-volumen que se encuentra en microcanales, lo cual ayuda a la nucleación en la pared, y al comportamiento de las burbujas que es afectado de forma significativa por la pequeña escala y difiere en gran medida del comportamiento macroscópico.

Para incrementar la evaporación del combustible o inyectar el combustible en la cámara de combustión, puede ser conveniente atomizar el líquido. Ya que los mecanismos se

vuelven más pequeños, el dispositivo utilizado en la atomización y las gotas han de ser más pequeños también. Puesto que la energía superficial de una gota es inversamente proporcional al radio de curvatura, una reducción en las dimensiones de los sistemas incrementará la presión y energía requerida para la atomización.

Otra cuestión es que el bajo número de Reynolds asociado con el comportamiento laminar del flujo en aparatos MEMS hace que el mezclado de los reactantes sea un problema potencial en microsistemas. Aunque el pequeño diámetro de los sistemas ayuda al mezclado por difusión, el tiempo de residencia de los fluidos en los canales es también pequeño y puede ser insuficiente para asegurar un mezclado completo. De esta forma, en algunos casos donde el mezclado de las diferentes especies pueda necesitar una mejora, se pueden implementar diferentes propuestas para ayudar a la dinámica del mezclado (inestabilidades en el flujo, ultrasonidos, etc.). Los problemas principales que surgen de estas propuestas son una mayor complejidad en la fabricación, el tamaño del sistema y pérdidas de presión mayores.

2.3. Transferencia de calor

En la escala de longitudes típica que se encuentra en dispositivos microcombustores, la transferencia de calor por convección natural es pequeña debido a que el flujo convectivo inducido es pequeño. Sin embargo, la transferencia de calor por conducción a través del gas a las superficies circundantes y por convección forzada en los canales de entrada y salida y en la cámara de combustión es significativa puesto que los gradientes de temperatura son mayores cuando la longitud característica va decreciendo. La transferencia de calor por radiación también aumenta mientras la longitud característica disminuye. Además mientras se va reduciendo la escala del sistema, el ratio superficie-volumen aumenta, lo que combinado con el mayor flujo de calor da como resultado unos efectos que son cada vez más importantes en la superficie y contorno del sistema. Esto tiene ventajas en ciertos componentes como intercambiadores de calor o evaporadores, pero puede resultar problemático en aparatos donde las pérdidas de calor en las superficies llegan a deteriorar su funcionamiento, de la misma manera que ocurre en cámaras de combustión donde puede aparecer un apagado de la llama cerca de las paredes.

Hay que prestar atención a que los pequeños esfuerzos convectivos y la baja conductividad del aire nos dan como resultado unas pérdidas de calor a través del combustor relativamente pequeñas en comparación con el calor total generado. Sin embargo, si existe un flujo forzado como puede ocurrir en el compresor de una turbina de gas, la transferencia de calor desde la cámara de combustión al aire entrante sería considerablemente mayor que en el caso anterior. La mayor transferencia de calor en el colector de entrada del combustor tiene especial relevancia en dispositivos que usan reactantes premezclados para la combustión. Mientras que el precalentamiento de los reactantes ayudaría a mantener la combustión en escalas menores de la distancia de extinción de la llama, puede dar lugar a la autoignición de la mezcla en el portal de entrada. Por esto se han de tomar medidas para aislar térmicamente la zona y así poder controlar la cantidad de calor que será transferida a la mezcla combustible/aire.

Como se mostraba previamente, la mayoría de los microdispositivos tienden a operar a temperaturas relativamente uniformes como causa de su pequeño tamaño. De esta forma, una temperatura uniforme podría de manera aproximada describir la temperatura interna del dispositivo. Bajos gradientes de temperatura reducen los esfuerzos debidos a la expansión y a la contracción térmica y sus efectos negativos en la alineación de las partes móviles. Sin embargo introducen problemas potenciales cuando se necesitan altos gradientes de temperatura para proporcionar un alto rendimiento al dispositivo, como en el caso de

generadores termoeléctricos. Lo mismo ocurre con los motores térmicos donde la eficiencia depende directamente de la relación entre las temperaturas del foco frío y el foco caliente, y puede resultar difícil alcanzar relaciones altas o mantenerlas.

Para solucionar estos problemas potenciales que se presentan puede ser necesario utilizar estructuras complejas con materiales altamente aislantes, espacios vacíos y/o complejas capas térmicas para aislar y reducir la transferencia de calor entre las regiones a alta y baja temperatura. Sin embargo hay que tener en cuenta también la transferencia de calor transitoria. Tiempos característicos muy diferentes en el gas o el sólido puede dar lugar a condiciones de cuasi-aislamiento en las paredes y contorno. Por ejemplo, si el tiempo de combustión en un motor de ignición por compresión es mucho menor que el tiempo que tarda en transferirse el calor a través de la cubierta del motor, las pérdidas de calor desde la reacción de combustión a las paredes podrían ser despreciables debido a la falta de tiempo para transferir el calor.

2.3.1. Combustión

La combustión en sistemas en micro-escala presenta problemas relacionados con el tiempo disponible para que la reacción ocurra y por la extinción de la reacción de combustión cerca de las paredes. La cinética química cerca de la pared, relacionada con la temperatura potencialmente baja en la pared y la formación de radicales, caracteriza la reacción de combustión. Una vez más, el requerimiento básico para que ocurra la microcombustión es que el tiempo físico disponible para la combustión (tiempo de residencia) debe ser mayor que el tiempo requerido para que la reacción química ocurra (tiempo de combustión). Para el caso de un combustor en una turbina de gas, el tiempo de residencia viene determinado por el tamaño de la cámara de combustión y el flujo másico de reactante a través de la cámara. Para sistemas cerrados como ocurre en un motor de combustión interna, además del tamaño de la cámara de combustión las revoluciones por minuto también determinan el tiempo de residencia. Ya que por lo general el tiempo de residencia en microcombustores será pequeño, es importante tener tiempos químicos pequeños para asegurar que el proceso de combustión se completa en el combustor. Por lo general, se pueden obtener bajos tiempos químicos asegurando altas temperaturas en la combustión, lo que a su vez se puede lograr reduciendo las pérdidas de calor a través de la cámara de combustión, previniendo la formación de radicales en la pared, aumentando la temperatura de los reactantes, usando mezclas estequiométricas, y usando combustibles altamente energéticos.

Mientras el volumen del combustor disminuye, el ratio superficie-volumen aumenta, resultando en mayores pérdidas por superficie y una destrucción potencial mayor de radicales en la pared. Estos mecanismos incrementarán el tiempo químico y posiblemente no permitirán la ignición de la reacción de combustión o llevarían la reacción ya iniciada a la extinción. Para superar o prevenir la extinción se pueden emplear ciertas técnicas, que son entre otras, usar combustores con exceso de entalpía, generar paredes adiabáticas apilando sistemas planos con distribuciones simétricas (condición de contorno de aislamiento en la pared), estableciendo paredes cerámicas de alta temperatura, y utilizando revestimientos térmicos. Los primeros trabajos fueron llevados a cabo por Lloyd y Weinberg [Ref.3]. En estos estudios, la reacción de combustión era optimizada usando la entalpía de los productos para precalentar la mezcla combustible/aire, en lo que se conoce como combustores "swiss roll", mostrado en Figura 1.

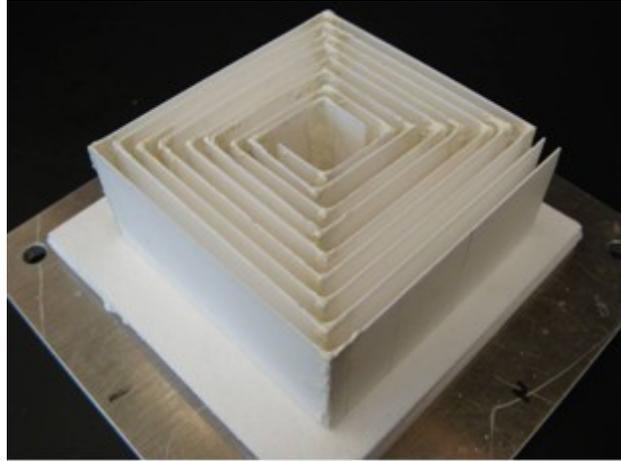


Figura 1: Combustor Swiss roll

Como resultado de este intercambio de entalpía obtenido por la recirculación de los productos, se ha obtenido una combustión estacionaria con mezclas bien por debajo de los límites de flamabilidad. Asimismo también se ha podido observar una combustión estable a temperaturas menores de las esperadas en una combustión homogénea con los combustibles probados, pero por encima de sus temperaturas catalíticas. El concepto de recircular los gases de escape para reducir pérdidas de calor desde la región de combustión y precalentar los reactantes entrantes también ha sido empleado para lograr la combustión en tubos delgados con diámetros menores que las distancias de extinción que se encuentran en la literatura. También se han desarrollado microcombustores usando este concepto. Con respecto a la distancia de extinción, cabe mencionar que las distancias que aparecen en la literatura son a menudo consideradas como la escala limitante para la combustión en micro-escala. Esto es un error conceptual, puesto que la distancia de extinción depende de la velocidad de reacción, y así de la temperatura, especies, y concentración de radicales (relacionado las pérdidas de calor y radicales en la pared). El problema de la extinción de la llama en la pared se puede evitar o reducir por medio de un aumento de la temperatura en la pared (la distancia de extinción de la llama es aproximadamente inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la temperatura) o de forma equivalente evitando pérdidas de calor a través de la pared (pared adiabática).

Las elevadas temperaturas de operación en las paredes del quemador no solo ayudan a prevenir la extinción, sino que también reducen el tiempo químico, lo que ayuda a contrarrestar los efectos adversos de los tiempos de residencia tan pequeños inherentes a los microcombustores. Si los reactantes no están premezclados y el combustible está en estado líquido, se requiere de un tiempo y volumen adicional para la evaporación y el mezclado. Este tiempo puede ser significativo comparado con el tiempo de residencia de una premezcla gaseosa, ya que la evaporación y el mezclado a los bajos números de Reynolds esperables en estos sistemas son generalmente bajos.

Un aspecto importante de la combustión en micro-escala que debería tenerse en cuenta es que a pesar de que incrementar el ratio superficie/volumen de los quemadores presenta un problema para las combustiones en estado gaseoso, se favorece la combustión catalítica. Aunque la reacción catalítica es generalmente más lenta que la reacción en fase gaseosa, y la pérdida de calor a través de las superficies también es un problema que afecta a la reacción catalítica, el incremento relativo de la superficie y las bajas temperaturas de la reacción catalítica sugieren que puede ser más fácil implementar quemadores en micro-escala usando este tipo de reacciones que aquellos utilizando reacciones en fase gaseosa.

Aunque las soluciones potenciales a las bajas temperaturas y los bajos tiempos de residencia aparentemente inherentes a los combustores en micro-escala podrían dar como

resultado dispositivos que operan de forma competitiva, se necesita una mayor comprensión de la cinética química a bajas temperaturas (homogénea y catalítica) y es muy probable que sea necesario el desarrollo de combustibles altamente energéticos y reactivos para lograr este objetivo. Además también es necesario modelos teóricos más precisos del proceso fisicoquímico que tiene lugar en la cámara de combustión.

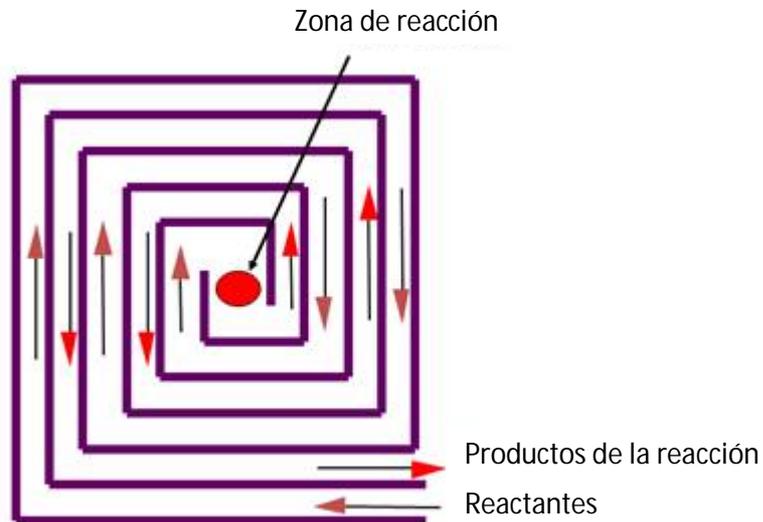


Figura 2: Esquema básico de un combustor swiss-roll, mostrando los reactantes a la entrada, la zona donde ocurre la reacción, y los productos a la salida.

2.4. Generación de potencia en micro-escala usando combustión. Aplicaciones

2.4.1. Introducción

Aunque el campo de la generación de potencia en micro-escala usando combustión es muy nuevo, hay varios proyectos en marcha para desarrollar quemadores en micro-escala y generadores de potencia que están relativamente bien avanzados. El objetivo final de la mayoría de estos proyectos es desarrollar usando combustión un sistema portátil, que genere potencia de forma autónoma, con una mejora en la densidad de energía sobre las baterías. A continuación se presenta una breve descripción de algunos de los proyectos, que se han agrupado en tres categorías: microcombustores, motores térmicos, y cohetes.

2.4.2. Microcombustores y reactores

Actualmente se están desarrollando muchos micro-combustores y reactores químicos, ya sean para usarlos en conjunción con materiales piezoeléctricos y termoelectrónicos para producir potencia o para usarlos en pilas de combustible. La ventaja más obvia que ofrece este tipo de aparatos es que carecen de partes móviles, pero el problema generalmente reside en la baja eficiencia del sistema completo. Aunque existen materiales termoelectrónicos que tienen

eficiencias atractivas, sufren de la dificultad de mantener grandes caídas de temperatura a través del material, debido a la pequeña escala de los dispositivos y porque materiales con buena conductividad térmica generalmente son buenos conductores eléctricos. De esta forma, la clave para el éxito de estos dispositivos reside en una buena gestión de las propiedades térmicas, o en la posibilidad de desacoplar las conductividades térmica y eléctrica.

Las características del Swiss-roll se han usado para desarrollar dispositivos de generación de potencia termoeléctrica mediante combustión en micro-escala. Varios investigadores han demostrado que este dispositivo puede producir potencia, aunque hasta la fecha, con baja eficiencia. Por esto se han propuesto nuevos diseños de este tipo de generadores de potencia basados en análisis termodinámicos que prometen ofrecer mejores eficiencias. El diseño específico que se ha propuesto consiste en una sección donde el calor es transferido a los reactantes en la entrada seguido de otra sección donde se descarta el calor no transferido a los alrededores que se encuentran fríos.

2.4.3. Turbinas de gas y motores de combustión interna

Se están desarrollando de forma pionera turbinas de gas generadoras de potencia basadas en MEMS, diseñadas para producir potencia del orden de 10W. Este tipo de turbinas incluiría un compresor radial, una cámara de combustión, y el generador eléctrico incorporado en el compresor. Aunque no se ha conseguido producir potencia positiva todavía, el desarrollo de los distintos componentes está bastante avanzado, con la turbina, el compresor, y el quemador actuando de forma independiente. Los problemas dominantes que surgen en estos sistemas tienen que ver con la transferencia de calor desde la cámara de combustión hasta la entrada de aire en el compresor junto con la dificultad de conseguir buenas tolerancias en la fabricación. Estos problemas mantienen la eficiencia bastante baja. Uno de los mayores logros conseguidos incluye la rotación de la turbina a más de 1 millón de rpm.

Se está llevando actualmente un proyecto de investigación para desarrollar motores de combustión interna del tipo Wankel que utilizan hidrocarburos en estado líquido con tamaños bien por debajo de los que se encuentran disponibles comercialmente. Dos motores están actualmente en fase de desarrollo, un motor "mini-rotativo" en mesoescala diseñado para proporcionar potencia del orden de 30W, y un motor "micro-rotativo" diseñado para producir potencia del orden de 1 mW. El Motor "mini-rotativo" está fabricado con acero mediante la técnica EDM. Se han realizado ensayos en este motor para examinar los efectos del sellado, la ignición, diseño, y el comportamiento térmico en la eficiencia, que ha sido bastante baja, del orden de 0.2%. La razón principal de que la eficiencia sea tan baja reside en la baja relación de compresión, debido a las filtraciones y pérdidas de presión entre las puntas del rotor y la carcasa y sobre las caras del rotor. El tamaño del motor se encuentra en el límite de la fabricación mediante EDM, y es difícil alcanzar las tolerancias requeridas para un buen sellado. Se está trabajando actualmente para mejorar el sellado y la relación de compresión.

Con respecto a los motores micro-rotativos, el objetivo del proyecto es desarrollar un motor con un rotor de un tamaño en el rango de milímetros, usando técnicas MEMS. Esta técnica es adecuada para la fabricación de estos motores debido a su construcción plana y su número reducido de partes. Medidas tomadas de piezas fabricadas del motor indican que el proceso de fabricación ha producido partes del motor viables para una investigación inicial sobre el sellado y características del material. A pesar de que surgen problemas en el proceso de fabricación, se pueden fabricar partes del motor con una calidad aceptable, pero a expensas una baja resistencia. Se han realizado pruebas para investigar el desgaste a largo plazo, la lubricidad, y la resistencia de los materiales. Distintos enfoques termodinámicos aplicados, o que se consideran para su aplicación, para estos motores rotativos miniaturizados

incluyen la recirculación del escape alrededor de la sección de combustión de la carcasa y reducir las pérdidas de calor envolviendo el motor en un contenedor de vacío o de un aerogel.

2.4.4. Microcohetes

Actualmente existen varios proyectos en desarrollo sobre microcohetes, la mayoría de ellos fabricados mediante técnicas MEMS y diseñados para aplicaciones espaciales tales como posicionamiento de microsátélites.

Capítulo 3

Combustión en canales estrechos sin recirculación de calor

3.1. Introducción

Después de una introducción a la combustión en pequeña escala, donde se han descrito de forma general sus características físico-químicas y térmicas, y cómo se comporta debido a esta reducción de escala, con cuestiones, problemas, y distintos enfoques para resolver dichos problemas asociados principalmente a las pérdidas de calor, y por último diversas aplicaciones que se encuentran en su mayoría en fase experimental, nos vamos a centrar en estudiar exclusivamente el efecto de la reducción en el tamaño característico en la combustión en canales delgados mediante un problema simplificado, basándonos en el combustor swiss-roll que desarrollaron Lloyd y Weinberg [Ref. 3].

Como se ha comentado en el capítulo anterior, la reducción en la escala característica que se persigue para la generación de micro-potencia ha incrementado la relación superficie/volumen en aparatos combustores. Un efecto producido por esta reducción en la escala es el aumento de las pérdidas de calor a través de las paredes, lo cual lleva a la extinción de la llama, inestabilidades y a una reducción de las eficiencias térmicas.

Debido a estos efectos indeseables surgen varias propuestas para poder superar los aumentos en las pérdidas de calor para quemadores en pequeña escala. A partir de este capítulo en adelante se va a estudiar lo que propusieron Lloyd y Weinberg por primera vez, que ya fue mencionado previamente y se conoce como combustión con exceso de entalpía. Los autores desarrollaron un combustor capaz de recircular el calor almacenado en los gases de escape para precalentar la mezcla fría de combustible y aire. Con esta técnica, se incrementan los límites de flamabilidad a menores concentraciones de combustible. En el estudio llevado a cabo por los autores también se realizaron medidas de los flujos máxicos máximos y mínimos de la mezcla combustible/aire por encima y por debajo de los cuales se producía la extinción de la llama.

Desde el trabajo realizado por Lloyd y Weinberg, muchos autores han utilizado métodos similares para desarrollar micro quemadores, mostrando que la micro combustión es posible con un manejo químico y térmico adecuado.

Para demostrar la efectividad de la recirculación de calor propuesta por Lloyd y Weinberg primero vamos a dedicar este capítulo en exclusiva a analizar un quemador que conste únicamente de un canal donde se permiten pérdidas de calor al exterior a través de una de sus paredes, y la otra está aislada térmicamente. Es previsible que se en cuanto la altura del canal disminuya la existencia de combustión sea cada vez más difícil, llegando a la extinción, incluso para valores muy bajos de pérdidas de calor a través de la pared. El propósito de este análisis reside en posteriormente poder comparar los resultados obtenidos para este caso con los obtenidos en un canal con recirculación de calor, donde se produce una transmisión de la entalpía de los productos de la reacción a los reactantes favoreciendo de forma ostensible la existencia de combustión para valores muy pequeños de la altura.

Esta es la razón y motivación principal de este trabajo, en el que se ha llevado a cabo un estudio bidimensional para analizar cómo afecta la recirculación de calor en la extinción de una llama pobre de premezcla. La reacción de combustión se modela de tal manera que se asume que la concentración de combustible es tan baja que la concentración de oxígeno permanece aproximadamente constante durante toda la reacción química. Es obvio que esta

suposición restringe la aplicabilidad de los resultados a llamas pobres y no se deben extrapolar los resultados a llamas ricas, cuya fenomenología es muy diferente.

Estudios previos informan del desarrollo de inestabilidades que inducen oscilaciones en la propagación de la llama en canales estrechos. De acuerdo con estos estudios, en canales adiabáticos, este comportamiento emerge solo cuando se utilizan combustibles altamente difusivos (número de Lewis Le más pequeño que la unidad). Por otra parte, cuando se permiten pérdidas de calor a través de las paredes del canal, se observa que esa inestabilidad se desarrolla para cualquier Le en un intervalo relativamente pequeño de flujos másicos $m \in [m_{min}, m_{max}]$ cuya amplitud varía con la altura del canal y la temperatura de las paredes. Como primer acercamiento al problema de recirculación de calor, y considerando que solo el caso equidifusivo $Le = 1$ es tratado, se decide restringir el análisis a la existencia de soluciones estacionarias.

Después de esta breve introducción, se dedicará el resto de este capítulo a estudiar la altura mínima del canal que permite la propagación de la llama cuando se permiten pérdidas de calor a través de una de sus paredes (Figura 3). Este resultado se comparará en posteriores capítulos con el comportamiento de una llama de premezcla propagándose a través de un canal en el que se permite la recirculación de calor (Figura 11).

3.2. Dominio

Se considera una mezcla combustible pobre que fluye a través de un canal estrecho de altura $2h_1$, comparable al espesor de la llama δ_T . La pared inferior del canal $y'_1 = -h_1$ está aislada térmicamente mientras que la pared superior $y'_1 = h_1$ es no adiabática. Asumiendo que la temperatura de la pared se mantiene a la temperatura de la mezcla fresca T_0 , en la pared superior se puede escribir $\partial T / \partial n = \tilde{b}(T - T_0)$, donde T representa la temperatura, n es la distancia normal a la superficie de la pared y \tilde{b} es un coeficiente de transferencia de calor genérico. Los casos limitantes se representan por $\tilde{b} = 0$ (pared adiabática) y $\tilde{b} = \infty$ (pared isotérmica).

Se puede ver un esquema del dominio con los ejes de referencia y las cotas en Figura 3.

3.3. Hipótesis del modelo

Se asume un flujo completamente desarrollado, con un perfil de velocidades de Poiseuille $\vec{v} = (m_1 u, 0)$, donde $u = [1 - (y'_1/h_1)^2]$ y m_1 es la velocidad máxima del fluido. Debido a la suposición de que hay propiedades constantes, la velocidad del flujo es independiente de la concentración y la temperatura. Con esta notación, m_1 es proporcional al flujo másico M , que puede ser escrito como $M/(\rho h_1) = 4m_1/3$, con ρ representando la densidad del fluido.

En unos ejes de referencia que se mueven con la llama a la velocidad de propagación, se definen las coordenadas axial $x = x'/(Pe h_1)$ y transversal $y = y'_1/h_1$, con $Pe = m_1 h_1 / D_{T_1}$, $u_f = U_f / S_L$, $Y = Y_F / Y_0$ y $\theta_1 = (T_1 - T_0) / (T_e - T_0)$ el número de Peclet, la velocidad de propagación de la llama, la fracción másica escalada y la temperatura adimensional, respectivamente. Aquí, S_L es la velocidad de propagación de una llama plana, U_f es la velocidad de propagación dimensional de la llama, Y_0 es la fracción másica del combustible de la mezcla combustible/aire a la entrada y $T_e = T_0 + QY_0/c_p$ es la temperatura adiabática de la llama con T_0 la temperatura inicial del fluido, Q el calor liberado por unidad de masa de combustible quemado, c_p el poder calorífico y D_{T_1} la difusividad térmica.

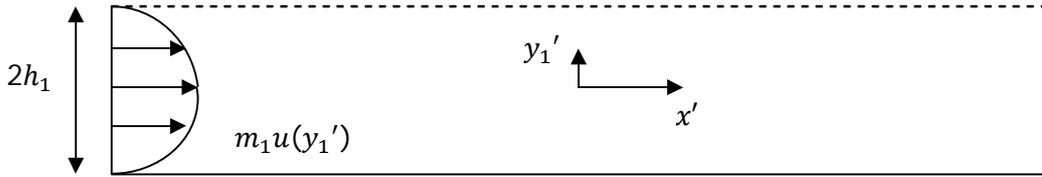


Figura 3: Esquema del canal, con ejes de referencia que se mueven a velocidad u_f . En la pared superior punteada se permite la transferencia de calor al exterior mientras que la pared inferior es adiabática.

3.4. Formulación

Con estas variables, las ecuaciones de la energía y de la fracción másica se pueden escribir como

$$\left[\frac{\sqrt{d}}{Pe} u_f + u(y_1) \right] \frac{\partial \theta_1}{\partial x} = \frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial y_1^2} + d\omega_0 \quad (1)$$

$$\left[\frac{\sqrt{d}}{Pe} u_f + u(y_1) \right] \frac{\partial Y}{\partial x} = \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y_1^2} \right) - d\omega_0 \quad (2)$$

Con

$$\omega_0 = \frac{\beta^2}{2Leu_p} Y \cdot \exp\left(\beta \frac{\theta_1 - 1}{1 + \gamma(\theta_1 - 1)}\right) \quad (3)$$

$d = [h_1 / (D_{T_1} / S_L)]^2$ y $Le = D_{T_1} / D = 1$ representando, respectivamente, la velocidad de reacción, el número de Damkhöler y el número de Lewis, aquí considerado constante e igual a la unidad, con D siendo la difusividad másica.

En las ecuaciones previas se ha introducido el número de Z'eldovich $\beta = E(T_e - T_0) / (R_g T_e^2) = 10$ y el parámetro de liberación de calor $\gamma = (T_e - T_0) / T_e = 0.7$. El factor $u_p = S_L / U_L$ que se ha introducido en la ecuación (1)-(2) tiene relación con la variación de la velocidad de la llama plana calculada con una energía de activación $\beta \rightarrow \infty$ usando la teórica U_L asintótica y la velocidad de la llama existente S_L calculada con $\beta = 10$. Este factor resulta ser $u_p = 0.943$ para $\beta = 10$ y $Le = 1$.

La integración de la ecuación (1) y (2) tanto en dirección axial como en la transversal permite, después de aplicarle las condiciones de contorno especificadas abajo, escribir una expresión explícita para el cálculo de la velocidad de propagación de la llama u_f , dando

$$u_f = \frac{d \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \omega_0 dx dy_1 - \int_{-1}^1 (1 - Y_{\infty}) u(y_1) dy_1}{\sqrt{d} / Pe \int_{-1}^1 (1 - Y_{\infty}) dy_1} \quad (4)$$

Donde Y_{∞} , que generalmente es una función de la coordenada transversal y_1 , representa la fracción másica en $x \rightarrow \infty$.

Las ecuaciones previas se complementan con las siguientes condiciones de contorno, donde se introduce el parámetro $b = \tilde{b} \cdot D_T/S_L$ que representa un coeficiente de transmisión de calor adimensional en la pared superior.

- En la pared inferior, condición de pared adiabática

$$y_1 = -1 : \frac{\partial \theta_1}{\partial y_1} = \frac{\partial Y}{\partial y_1} = 0$$

- En la pared superior, se permite la transferencia de calor al exterior

$$y_1 = 1 : \frac{\partial \theta_1}{\partial y_1} + b\sqrt{d} \cdot \theta_1 = \frac{\partial Y}{\partial y_1} = 0, \quad b = \tilde{b} \frac{D_T}{S_L}$$

- En la entrada del canal, se consideran nulos la temperatura del fluido y el consumo de combustible

$$x \rightarrow -\infty : \theta_1 = 1 - Y = 0$$

- A la salida del canal se consideran temperatura y fracción másica uniformes

$$x \rightarrow \infty : \frac{\partial \theta_1}{\partial x} = \frac{\partial Y}{\partial x} = 0$$

Con las condiciones de contorno en la pared arriba escritas se considerará una solución intermedia entre la pared adiabática $b = 0$, y la pared isotérmica $b \rightarrow \infty$ con temperatura nula en la pared.

3.5. Resolución del problema numéricamente

3.5.1. Discretización

Para la resolución del problema de forma numérica se discretizan las ecuaciones mediante diferencias finitas utilizando un esquema *upwind* de segundo orden con cuatro puntos en la dirección axial y tres puntos en la dirección transversal.

A continuación se muestran las aproximaciones de las derivadas de primer y segundo orden que se han llevado a cabo mediante series de Taylor.

- Para las derivadas primeras, que describen los efectos convectivos, se hace una discretización en diferencias finitas *upwind* con una precisión de segundo orden, que dependiendo de si la velocidad u en el canal es positiva o negativa queda

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{3\varphi_{i,j} - 4\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i-2,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \text{ si } u > 0$$

(5)

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{-3\varphi_{i,j} + 4\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i+2,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \text{ si } u > 0$$

- Las derivadas segundas, que describen los efectos difusivos, se discretizan mediante un esquema en diferencias finitas centradas de segundo orden de precisión, quedando

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

(6)

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right|_{i,j} = \frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j-1}}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2)$$

3.5.1.1. Dominio

Se procede a discretizar el dominio en una malla computacional uniforme tanto en el eje x como en el eje y , con N_x nodos en la dirección axial y N_y nodos en la dirección transversal

$$x_i = x_{min} + (i - 1) \cdot \Delta x \quad i = 1, 2 \dots N_x$$

$$y_j = y_{min} + (j - 1) \cdot \Delta y \quad j = 1, 2 \dots N_y$$

$$\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N_x - 1}$$

$$\Delta y = \frac{y_{max} - y_{min}}{N_y - 1}$$

Se tendrá que en la dirección transversal $y_{max} = -y_{min} = 1$ mientras que en la dirección axial no hay un valor predeterminado para $x_{max} = -x_{min}$ aunque para asegurar la independencia de los resultados con el dominio computacional se han utilizado valores suficientemente altos, de manera que no influya en los resultados. En cuanto a la precisión de la malla computacional se han utilizado valores de $\Delta x = \Delta y = 0.01$.

Para comprobar la independencia de los resultados con el tamaño de la malla se ha calculado la temperatura para distintos valores de $x_{max} = -x_{min} = (3, 4, 5, 6)$ manteniendo $\Delta x = \Delta y = \text{cte}$, para posteriormente comparar las temperaturas, de manera que el valor máximo de la diferencia en valor absoluto entre la temperatura con $x_{max} = 3$ y la temperatura con $x_{max} = 4$ es

$$\max(|\theta_{x_{max}=4} - \theta_{x_{max}=3}|) = 0.0113$$

Mientras que la diferencia para valores entre $x_{max} = 4$ y $x_{max} = 5$ es

$$\max(|\theta_{x_{max}=5} - \theta_{x_{max}=4}|) = 1.2 \cdot 10^{-6}$$

Y por último entre $x_{max} = 5$ y $x_{max} = 6$ la diferencia es

$$\max(|\theta_{x_{max}=6} - \theta_{x_{max}=5}|) = 1.0 \cdot 10^{-9}$$

Con estos datos se concluye que basta con escoger unos valores límite del dominio computacional de $x_{max} = -x_{min} = 4$ ya que a partir de aquí el tamaño del dominio computacional sólo afecta a la solución con una variación del orden de 10^{-6} , de manera que es despreciable. Se ha duplicado en algún caso el número de nodos y se comprueba que la solución permanece independiente del tamaño de la malla.

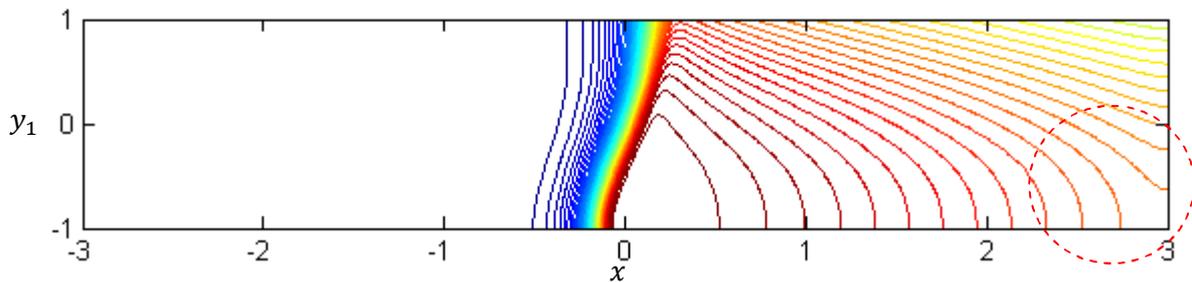


Figura 4: Isothermas de $\theta_1 \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1 = 0.02$, calculadas a partir de una malla computacional con $x_{max} = -x_{min} = 3$. Rodeado por una zona punteada roja se aprecian los efectos de borde.

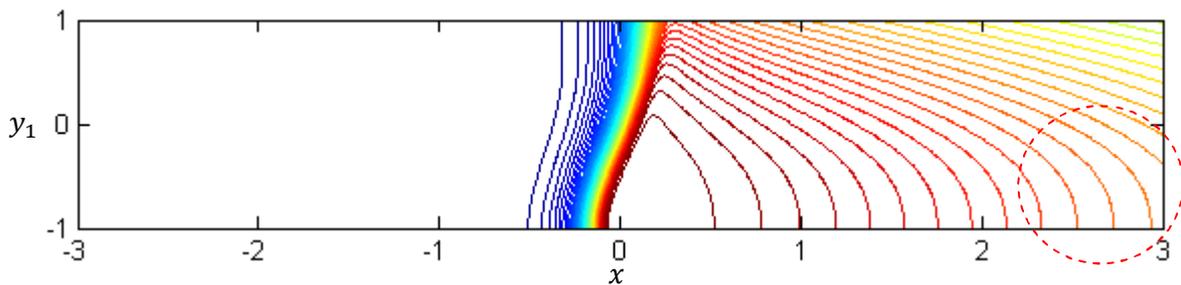


Figura 5: Isothermas de $\theta_1 \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1 = 0.02$, calculadas a partir de una malla computacional con $x_{max} = -x_{min} = 4$. Rodeado por una zona punteada roja se aprecia la desaparición de los efectos de borde al haber extendido el dominio computacional.

En Figura 4 y Figura 5 se pueden apreciar los efectos de borde en las isothermas para mallas computacionales con $x_{max} = 3$ y $x_{max} = 4$ respectivamente, aunque su efecto lejos del borde es prácticamente despreciable, observándose en la zona de puntos rojos el efecto que producen los límites en el dominio computacional.

3.5.1.2. Ecuaciones que gobiernan el problema

Según el esquema propuesto anteriormente, la discretización de las ecuaciones del calor y de la fracción másica en el fluido quedarían de la siguiente forma

- Temperatura en el canal

$$\left[\frac{\sqrt{d}}{Pe} u_f + u_{1j} \right] \frac{3\theta_{1i,j} - 4\theta_{1i-1,j} + \theta_{1i-2,j}}{2\Delta x} - \frac{1}{Pe^2} \frac{\theta_{1i+1,j} - 2\theta_{1i,j} + \theta_{1i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{\theta_{1i,j+1} - 2\theta_{1i,j} + \theta_{1i,j-1}}{\Delta y^2} = d\omega_{0i,j} \quad (7)$$

- Fracción másica en el canal

$$\left[\frac{\sqrt{d}}{Pe} u_f + u_{1j} \right] \frac{3Y_{1i,j} - 4Y_{1i-1,j} + Y_{1i-2,j}}{2\Delta x} - \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{Pe^2} \frac{Y_{1i+1,j} - 2Y_{1i,j} + Y_{1i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{Y_{1i,j+1} - 2Y_{1i,j} + Y_{1i,j-1}}{\Delta y^2} \right) = -d\omega_{0i,j} \quad (8)$$

Donde la velocidad de propagación de la llama u_f es igual a

$$u_f = \frac{d \sum_{i=1}^{i=Nx-1} \sum_{j=1}^{j=Ny-1} \frac{\omega_{0i,j} + \omega_{0i+1,j} + \omega_{0i,j+1} + \omega_{0i,j-1}}{4} \cdot \Delta x \Delta y - \sum_{j=1}^{j=Ny} (1 - Y_{Nx,j}) u_j \Delta y}{\sqrt{d}/Pe \cdot \sum_{j=1}^{j=Ny} (1 - Y_{Nx,j}) \Delta y} \quad (9)$$

3.5.1.3. Condiciones de contorno

Se aplica el mismo procedimiento para discretizar las condiciones de contorno, que tendrán una precisión de segundo orden, quedando

- En la pared adiabática

$$\begin{cases} \theta_{1i,j+1} = \theta_{1i,j-1} \\ Y_{ij+1} = Y_{ij-1} \end{cases} \quad i = 1, 2 \dots Nx, \quad j = 1$$

- En la pared donde se permite el intercambio de calor

$$\begin{cases} \frac{3\theta_{1i,j} - 4\theta_{1i,j-1} + \theta_{1i,j-2}}{2\Delta y} = -b\sqrt{d} \cdot \theta_{1i,j} \\ Y_{ij-1} = Y_{ij+1} \end{cases} \quad i = 1, 2 \dots Nx, \quad j = Ny$$

con

$$b = \tilde{b} \frac{D_T}{S_L}$$

- En la salida del flujo

$$\begin{cases} \theta_{1_{i+1,j}} = \theta_{1_{i-1,j}} \\ Y_{i+1,j} = Y_{i-1,j} \end{cases} \quad i = Nx, \quad j = 1, 2 \dots Ny$$

- En la entrada del flujo

$$\begin{cases} \theta_{1_{i,j}} = 0 \\ Y_{i,j} = 0 \end{cases} \quad i = 1, \quad j = 1, 2 \dots Ny$$

3.5.1.4. Resolución de los sistemas de ecuaciones lineales

El procedimiento para resolver los sistemas de ecuaciones se describe de forma resumida en el siguiente diagrama

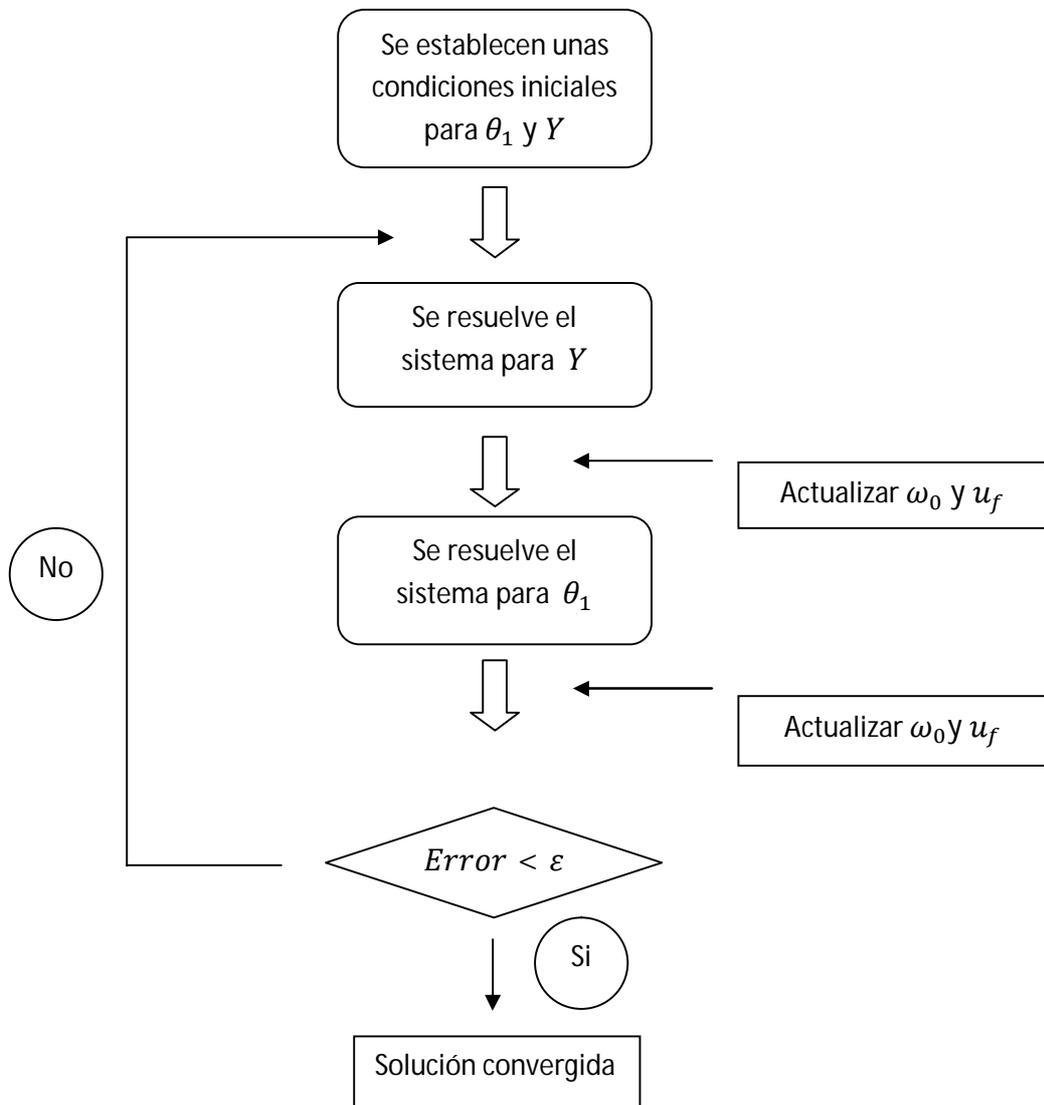


Figura 6: diagrama de flujo con los pasos para la resolución de los sistemas de ecuaciones

Los dos sistemas se resuelven por un método iterativo al tratarse de sistemas muy grandes donde el coste computacional para resolverlos de forma directa es extremadamente alto. El método iterativo utilizado es el de *Gauss-Seidel*. Se ha implementado mediante una rutina que ahorra espacio en la memoria almacenando solo los valores no nulos de las matrices, lo cual disminuye mucho el coste computacional y el tiempo de cálculo. En el apartado apéndices se puede encontrar más información acerca de la rutina utilizada.

Como se observa en el diagrama, en el primer paso se definen unas condiciones iniciales para las dos incógnitas, que son las que se utilizarán para la primera iteración. Estas condiciones iniciales se muestran abajo, donde x_0 es un punto entre $x = -L$ y $x = 0$ donde estimamos de forma inicial la situación de la llama, y δ es un factor que representa una mayor o menor pendiente. Se ha utilizado un valor de $\delta = 0.1$. Valores menores inducen una mayor pendiente lo cual puede producir errores si la malla no está lo suficientemente refinada.

$$\theta_1 = 0.8 \cdot \frac{1 + \tanh\left(\frac{x-x_0}{\delta}\right)}{2} \quad (10)$$

$$Y_1 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{x-x_0}{\delta}\right)}{2}$$

Las condiciones iniciales tienen esta estructura para asemejarse al perfil de la temperatura y de la fracción másica a lo largo del canal y facilitar la convergencia. A partir de aquí se entra en un bucle en el que se van resolviendo los sistemas de forma iterativa para la fracción másica y la temperatura. Mientras, se recalcula la velocidad de reacción contenida en la matriz para la fracción másica y también en el vector de términos independientes para la temperatura, b . Además, el término u_f se recalcula en cada iteración. Cuando termina cada iteración, para comprobar si estamos ante una solución convergida, se calcula la diferencia entre la temperatura en la iteración actual con la iteración anterior, y si $\theta_1^{m+1} - \theta_1^m < \varepsilon$ se considera que se ha alcanzado una solución válida con la suficiente precisión.

Si no se cumple la condición anterior se itera de nuevo hasta que se alcanza, o hasta un número de iteraciones máximo ite_{max} en el que si no se ha alcanzado la convergencia se considera que no existe solución válida aparte de la trivial $\theta_1 = Y_1 = 0$. Se ha usado un valor para $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$ que asegure una precisión suficiente en los resultados.

3.6. Resultados

A continuación se muestran varios casos para observar cómo afecta a la llama el parámetro d y el coeficiente de transmisión de calor en la pared superior b . Mientras el coeficiente b aumenta, las pérdidas de calor aumentan también, hasta que se alcanza un valor $b = b_c$ encima del cual la combustión no se puede mantener. Según esto, si $b > b_c$ el sistema de ecuaciones (1)-(2) no tiene solución aparte de la solución trivial $\theta_1 = Y = 0$.

Los canales muy estrechos son extremadamente sensibles a las pérdidas de calor, debido a la alta relación entre superficie volumen, y valores muy bajos de b son capaces de extinguir la llama por completo. Por otra parte se ha comprobado que $b_c \rightarrow \infty$ si el número de

Damkholer supera $d \cong 12.5$, con una llama que continúa propagándose a través del canal a pesar de que se observa una extinción parcial en la región cercana a la pared superior, como se puede ver en Figura 9. Se aprecia cómo según aumenta el coeficiente de transmisión de calor la velocidad de reacción se reduce cerca de la pared superior, hasta llegar incluso a no existir velocidad de reacción.

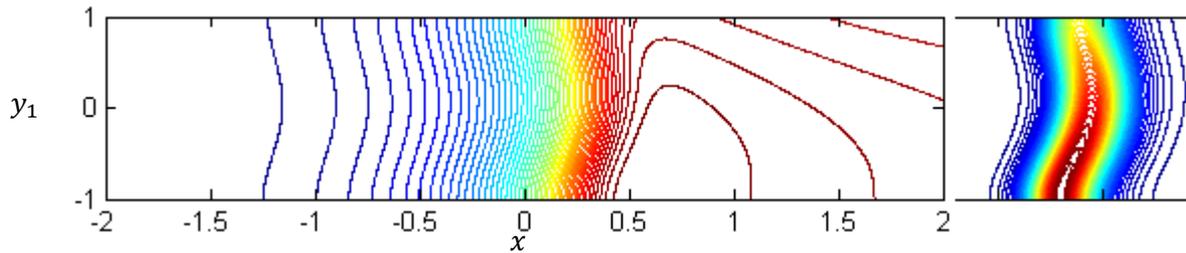


Figura 7: Isothermas de $\theta_1 \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1 = 0.02$, para valores de $d=1$, $Pe=3$ y coeficiente de transmisión de calor en la pared superior de $b=0.05$. A la derecha se muestran los isocontornos para la velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max} \in (0, 1)$ y $\Delta\omega_0/\omega_{0,max} = 0.02$, $\omega_{0,max} = 1.22$

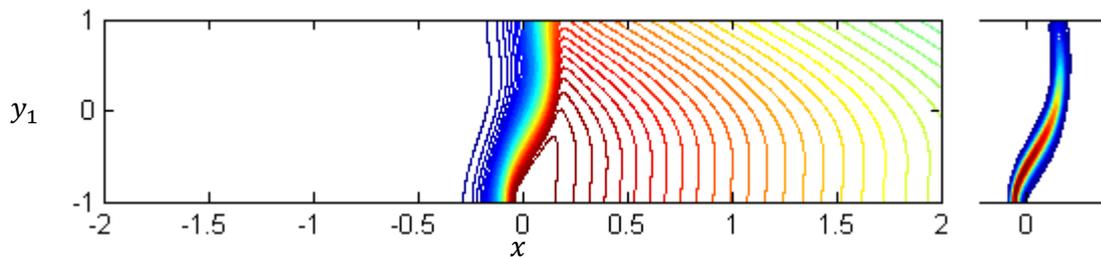


Figura 8: Isothermas de $\theta_1 \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1 = 0.02$, para valores de $d=5$, $Pe=10$ y coeficiente de transmisión de calor en la pared superior de $b=0.1$. A la derecha se muestran los isocontornos para la velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max} \in (0, 1)$ y $\Delta\omega_0/\omega_{0,max} = 0.02$, $\omega_{0,max} = 1.83$.

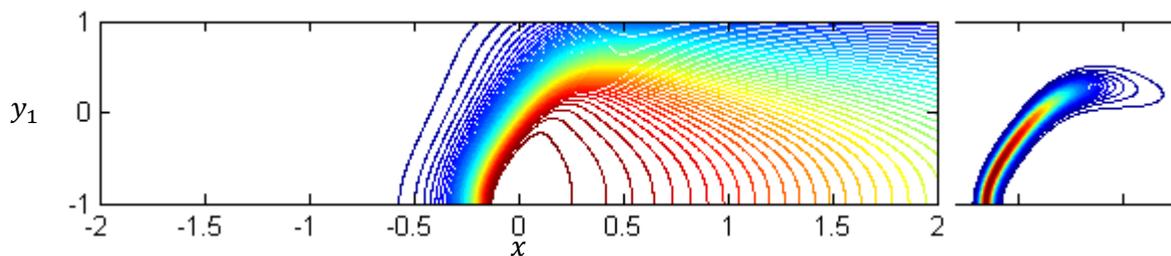


Figura 9: Isothermas de $\theta_1 \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1 = 0.02$, para valores de $d=12$, $Pe=3$ y coeficiente de transmisión de calor en la pared superior de $b=1$. A la derecha se muestran los isocontornos para la velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max} \in (0, 1)$ y $\Delta\omega_0/\omega_{0,max} = 0.02$, $\omega_{0,max} = 1.82$. Se ve como se produce una extinción parcial de la llama cerca de la pared superior.

Por último se puede ver a continuación en la Figura 10 la dependencia del valor crítico del coeficiente de pérdidas de calor b_c con el parámetro d comprobándose que efectivamente valores muy bajos de d provocan la extinción del canal incluso para pérdidas de calor prácticamente nulas, limitando mucho la existencia de combustión para canales estrechos. Debido a estas limitaciones, vamos a estudiar en el capítulo siguiente un modo de contrarrestar las pérdidas de calor a través de la pared superior, basándonos en el trabajo realizado por Lloyd y Weinberg [Ref. 3]. En este trabajo se demostraba que utilizando dos

canales paralelos en contracorriente, es posible transferir parte de la entalpía de los productos de escape a la mezcla entrante precalentándola, extendiendo de esta forma los límites para los cuales se puede encontrar combustión. A este tipo de combustores se los denominó Swiss-roll.

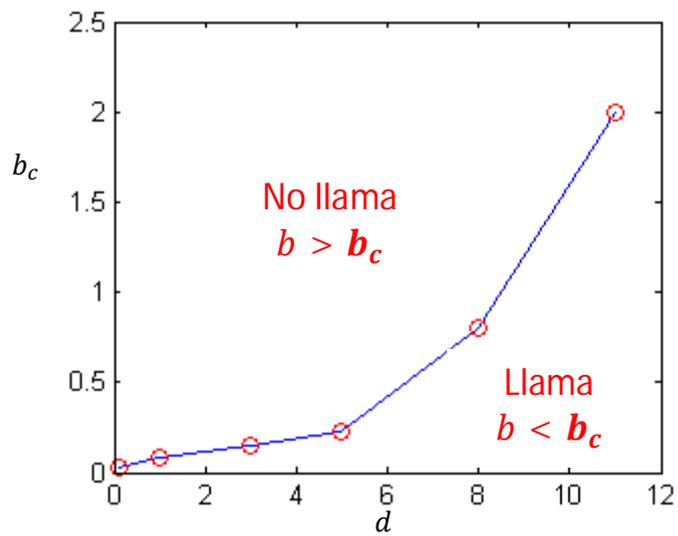


Figura 10: Evolución del coeficiente de pérdidas de calor crítico b_c a través de las paredes frente al aumento del número de Damkhöler d . Se tendrá que no es posible mantener la combustión para $b > b_c$, obteniéndose como único resultado la solución trivial $\theta_1 = Y = 0$

Capítulo 4

Combustión en canales estrechos con recirculación de calor

4.1. Introducción

Para reducir las dificultades relacionadas con la disminución en la escala mencionadas en el tema anterior, Lloyd y Weinberg [Ref. 3] desarrollaron un combustor que usaba la entalpía de los gases de escape para precalentar la mezcla fría de aire/combustible antes de alcanzar la cámara de combustión. Como resultado de la recirculación del calor, se obtenía una combustión estacionaria con mezclas bastante por debajo de los límites de flamabilidad. Con esto en mente, lo que se propone es con una configuración simplificada estudiar los efectos de la recirculación de calor en combustión, con el objetivo de superar las pérdidas de calor a través de las paredes que ocurrían en el capítulo anterior al no recircular el calor.

4.2. Dominio

Se considera una mezcla de combustible pobre que fluye a través de un canal estrecho de altura $2h_1$, comparable al espesor de la llama δ_T , y un fluido inerte moviéndose en sentido contrario por un canal paralelo de altura $2h_2$. Los dos canales comparten la pared interna y los dos tienen la pared externa aislada térmicamente. Existe una región de longitud $2L$ en la pared común donde se permite el intercambio de calor, con el resto de la pared también térmicamente aislada.

Se puede ver un esquema del problema en la Figura 11 donde los parámetros principales están incluidos. Las coordenadas x e y_i indican las distancias axiales y transversales con h_i y L indicando, respectivamente, la altura del canal y la longitud de la región térmicamente activa en la pared interna que separa ambos canales. Se asume un flujo de Poiseuille completamente desarrollado, con un perfil de velocidad $\vec{v} = \pm(m_i u, 0)$, donde $u = [1 - (y'_i/h_i)^2]$ y los símbolos más y menos que van asociados al fluido en el canal 1 y en el canal 2 respectivamente.

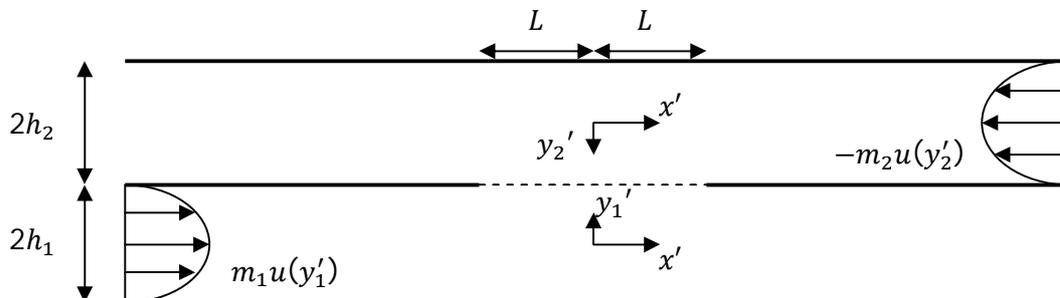


Figura 11: Esquema de los dos canales con flujos paralelos, mostrando ejes de referencia y perfiles de velocidad en cada canal. En la pared compartida existe una zona de longitud $2L$ donde se permite el intercambio de calor entre los dos canales mientras el resto de paredes son adiabáticas. El canal de abajo tiene una altura de $2h_1$ y el superior de $2h_2$

4.3. Hipótesis del modelo

Se asumen propiedades constantes, por lo que la velocidad de ambos fluidos es independiente de la temperatura y de la densidad.

4.4. Formulación

Para escribir el problema de forma adimensional, se definen las coordenadas axial $x = x'/(Pe h_1)$ y transversal $y = y'_1/h_1$, la fracción másica de combustible normalizada $Y = Y_F/Y_0$ y la temperatura adimensional $\theta_i = (T_i - T_0)/(T_e - T_0)$ donde T_e y T_0 se han definido previamente. Para simplificar, se asumen números de Peclet iguales para los dos fluidos $Pe_1 = Pe_2 = Pe = m_i h_1 / D_{T_i}$. Una vez introducidas las variables adimensionales, las ecuaciones de la energía y fracción másica quedan

$$u_1(y_1) \frac{\partial \theta_1}{\partial x} = \frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial y_1^2} + d\omega_0 \quad (11)$$

$$u_1(y_1) \frac{\partial Y_1}{\partial x} = \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_1}{\partial y_1^2} \right) - d\omega_0 \quad (12)$$

$$-u_2(y_2) \frac{\partial \theta_2}{\partial x} = \frac{1}{Pe^2} \frac{h_2}{h_1} \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x^2} + \frac{1}{h_2/h_1} \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial y_2^2} \quad (13)$$

Donde la velocidad de reacción está definida arriba en la ecuación (3). Las ecuaciones previas se complementan con las siguientes condiciones de contorno

- Las paredes exteriores son adiabáticas

$$y_2 = y_1 = -1 : \frac{\partial \theta_1}{\partial y_1} = \frac{\partial \theta_2}{\partial y_2} = \frac{\partial Y}{\partial y_1} = 0 \quad (14)$$

- La pared interna que comparten ambos canales tiene una zona delimitada donde el intercambio de calor se permite. El resto es adiabática. En toda la longitud de la pared interna se tiene que el gradiente de la fracción másica es nulo en la dirección transversal

$$y_2 = y_1 = 1 : \begin{cases} \frac{\partial Y}{\partial y_1} = 0 \\ -L < x < L : \frac{\partial \theta_1}{\partial y_1} = -\frac{m_2}{m_1} \frac{\partial \theta_2}{\partial y_2}, \theta_1 = \theta_2 \\ x > L, x < -L : \frac{\partial \theta_1}{\partial y_1} = \frac{\partial \theta_2}{\partial y_2} = 0 \end{cases} \quad (15)$$

- En la entrada del fluido del canal 1 se suponen fracción másica igual a la unidad y temperatura nula, mientras que en la salida del fluido 2 se supone un gradiente de temperatura en la dirección axial nulo

$$x \rightarrow -\infty : \frac{\partial \theta_2}{\partial x} = 0, \quad \theta_1 = 0, \quad Y = 1 \quad (16)$$

- En la salida del fluido del canal 1 se suponen gradientes de temperatura y fracción másica en la dirección axial nulos mientras que la temperatura del fluido 2 es nula a la entrada

$$x \rightarrow \infty : \frac{\partial \theta_1}{\partial x} = 0, \quad \theta_2 = 0, \quad \frac{\partial Y}{\partial x} = 0 \quad (17)$$

Se considera que la pared que separa ambos canales es infinitamente delgada. El número de Zeldovich β , el número de Lewis Le y el parámetro de liberación de calor γ , ya definidos para el problema en un solo canal, se mantienen constantes con los valores previamente indicados. De manera distinta a estos tres parámetros, el número de Damköhler $d = [h_1/(D_{T_1}/S_L)]^2$, el ratio de velocidades m_2/m_1 y la relación entre las alturas de los dos canales h_2/h_1 se irá variando a la vez que la longitud de la región donde está permitida la transferencia de calor L para estudiar sus efectos en la extinción de la llama.

La integración tanto en la dirección axial como en la transversal de las ecuaciones previas da como resultado

$$\begin{aligned} \frac{4}{3} &= d \int_{x=-\infty}^{x=\infty} \int_{y=-1}^{y=1} \omega_0 dx dy \\ \frac{4}{3}(\theta_{1,\infty} - 1) &= \int_{x=-L}^{x=L} \left. \frac{\partial \theta_1}{\partial y} \right|_{y=1} dx \\ \theta_{1,\infty} - 1 &= -\frac{m_2 h_2}{m_1 h_1} \theta_{2,-\infty} \end{aligned} \quad (18)$$

Donde $Y(x \rightarrow \infty) = 0$ y se asumen perfiles uniformes de temperatura en $x \rightarrow \infty$, $\theta_{1,\infty}$, y en $x \rightarrow -\infty$, $\theta_{2,-\infty}$.

4.5. Resolución del problema numéricamente

4.5.1. Introducción

Para resolver el problema descrito anteriormente de forma numérica, se ha integrado usando diferencias finitas en un esquema *upwind* de segundo orden con cuatro puntos en la dirección x y tres puntos en la dirección y .

4.5.2. Discretización

Según el esquema mencionado previamente, para discretizar las ecuaciones de conservación se sustituyen las derivadas por sus correspondientes aproximaciones por series de Taylor mostradas en la sección anterior (5)-(6). También se discretizan de igual manera las condiciones de contorno.

4.5.2.1. Dominio

Se discretiza el dominio en una malla uniforme tanto en el eje x como en el eje y , teniendo N_x nodos en la dirección axial y N_y nodos en la dirección transversal, quedando

$$x_i = x_{min} + (i - 1) \cdot \Delta x \quad i = 1, 2 \dots N_x$$

$$y_j = y_{min} + (j - 1) \cdot \Delta y \quad j = 1, 2 \dots N_y$$

$$\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N_x - 1}$$

$$\Delta y = \frac{y_{max} - y_{min}}{N_y - 1}$$

Al igual que en el caso con un solo canal, también se hace un estudio de la dependencia de la temperatura obtenida con los límites del dominio computacional x_{max} y x_{min} . El objetivo es determinar los valores mínimos de los límites del dominio computacional a partir de los cuales la solución no varía aunque se extiendan dichos límites. Es decir, se quiere asegurar que la solución es independiente de estos valores x_{max} y x_{min} .

Para estudiar la dependencia de la temperatura con x_{max} y x_{min} se ha escogido una serie de parámetros arbitrarios donde se sabe que existe combustión, y donde la longitud de la región en la que se permite el intercambio de calor es la más alta de todos los casos que se van a calcular, $L = 1.8$, ya que a priori se puede suponer que a mayor longitud L , más lejos se podrán sentir sus efectos con respecto a $x = 0$.

Con estos parámetros se calcula la temperatura para valores de $x_{max} = -x_{min} = (3, 4, 5)$ y $\Delta x = \Delta y = 0.01$, y se comprueba si existe diferencia entre las temperaturas. Para cuantificar esta diferencia se ha calculado la resta de las matrices temperatura para los tres casos anteriores, y posteriormente se extrae el valor máximo del valor absoluto de esta resta. Este valor máximo será el indicativo de cómo afectan los límites del dominio a la solución.

Finalmente se tendrá que entre $x_{max} = 3$ y $x_{max} = 4$ este valor máximo será de $\max(|\theta_{x_{max}=4} - \theta_{x_{max}=3}|) = 1.9 \cdot 10^{-3}$, mientras que la diferencia entre calcular la temperatura con $x_{max} = 4$ y $x_{max} = 5$ será de $\max(|\theta_{x_{max}=5} - \theta_{x_{max}=4}|) = 1.448 \cdot 10^{-5}$. A la vista de estos resultados se puede concluir que un valor de $x_{max} = 4$ será suficiente para asegurar la independencia de la temperatura con los límites del dominio computacional, ya que se observa un error del orden de 10^{-5} , que podemos considerar despreciable.

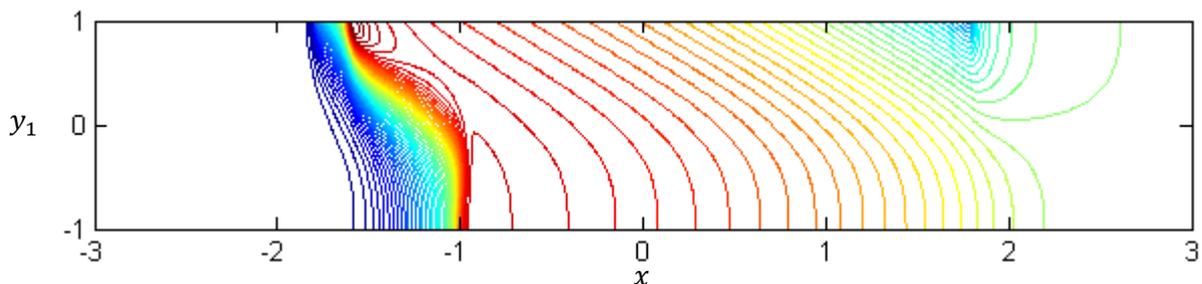


Figura 12: Isotermas para la temperatura en el canal 1 $\theta_1/\theta_{1,max} \in (0, 1)$ con $\Delta \theta_1/\theta_{1,max} = 0.02$, $\theta_{1,max} = 1.167$, calculadas a partir de una malla computacional con $x_{max} = -x_{min} = 3$. No se aprecian efectos de borde.

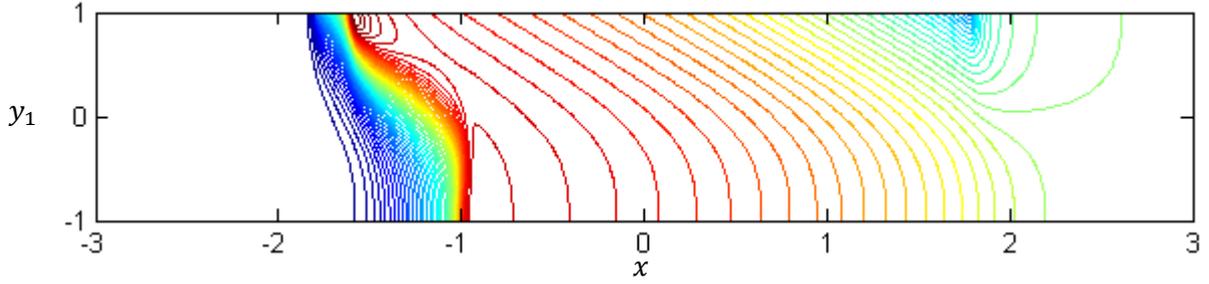


Figura 13: Isotermas en el canal 1 de $\theta_1/\theta_{1,max} \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1/\theta_{1,max} = 0.02$, $\theta_{1,max} = 1.167$, calculadas a partir de una malla computacional con $x_{max} = -x_{min} = 4$. No hay cambios apreciables en comparación con la solución calculada a partir de $x_{max} = -x_{min} = 3$, al ser el error del orden de $\sim 10^{-3}$

4.5.2.2. Ecuaciones que gobiernan el problema

Según el esquema propuesto anteriormente, la discretización de las ecuaciones para la temperatura y la fracción másica en el fluido 1, y la temperatura en el fluido 2, respectivamente, quedaría de la siguiente forma:

- Temperatura para el fluido 1

$$u_{1j} \frac{3\theta_{1i,j} - 4\theta_{1i-1,j} + \theta_{1i-2,j}}{2\Delta x} - \frac{1}{Pe^2} \frac{\theta_{1i+1,j} - 2\theta_{1i,j} + \theta_{1i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{\theta_{1i,j+1} - 2\theta_{1i,j} + \theta_{1i,j-1}}{\Delta y^2} = d\omega_{0i,j} \quad (19)$$

- Fracción másica para el fluido 1

$$u_{1j} \frac{3Y_{1i,j} - 4Y_{1i-1,j} + Y_{1i-2,j}}{2\Delta x} - \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{Pe^2} \frac{Y_{1i+1,j} - 2Y_{1i,j} + Y_{1i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{Y_{1i,j+1} - 2Y_{1i,j} + Y_{1i,j-1}}{\Delta y^2} \right) = -d\omega_{0i,j} \quad (20)$$

- Temperatura para el fluido 2

$$-u_{1j} \frac{-3\theta_{2i,j} + 4\theta_{2i+1,j} + \theta_{2i+2,j}}{2\Delta x} - \frac{1}{Pe^2} \frac{h_2}{h_1} \frac{\theta_{2i+1,j} - 2\theta_{2i,j} + \theta_{2i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{1}{h_2/h_1} \frac{\theta_{2i,j+1} - 2\theta_{2i,j} + \theta_{2i,j-1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (21)$$

Posteriormente, una vez se haya resuelto el sistema de ecuaciones, resulta muy útil calcular con los resultados obtenidos de forma numérica las integrales en la dirección axial y transversal (18), con el objetivo de medir la precisión de la solución numérica. A partir de estas expresiones se utilizará como condición de convergencia la expresión $E < \varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$, donde el error E se define como $E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$. La discretización de estas tres ecuaciones queda

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{4}{3} - d \cdot \sum_{i=1}^{i=Nx-1} \sum_{j=1}^{j=Ny-1} \frac{\omega_{0i,j} + \omega_{0i+1,j} + \omega_{0i,j+1} + \omega_{0i,j-1}}{4} \cdot \Delta x \Delta y \\ \varepsilon_2 &= \frac{4}{3} (\theta_{1Nx,j} - 1) - \sum_{x(i)=-L}^{x(i)=L} \frac{3\theta_{1i,Ny} - 4\theta_{1i,Ny} + \theta_{1i,Ny}}{2\Delta x} \cdot \Delta y \\ \varepsilon_3 &= (\theta_{1Nx,j} - 1) - \frac{m_2 h_2}{m_1 h_1} \theta_{21,j} \end{aligned} \quad (22)$$

4.5.2.3. Condiciones de contorno

Se aplica el mismo procedimiento para discretizar las condiciones de contorno, con una precisión de segundo orden, de manera que queda

- En las paredes exteriores

$$\begin{cases} \theta_{1i,j+1} = \theta_{1i,j-1} \\ Y_{i,j+1} = Y_{i,j-1} \\ \theta_{2i,j+1} = \theta_{2i,j-1} \end{cases} \quad i = 1, 2 \dots Nx, \quad j = 1$$

- En la pared interna, en la zona donde se permite el intercambio de calor

$$i = 1, 2 \dots Nx, \quad j = Ny$$

$$\begin{cases} \frac{3\theta_{1i,j} - 4\theta_{1i,j-1} + \theta_{1i,j-2}}{2\Delta y} = -\frac{m_2}{m_1} \frac{3\theta_{2i,j} - 4\theta_{2i,j-1} + \theta_{2i,j-2}}{2\Delta y} \\ \theta_{2i,j} = \theta_{1i,j} \\ Y_{i,j+1} = Y_{i,j-1} \end{cases} \quad -L < x_i < L$$

- En la pared interna, en la zona adiabática

$$x_i < -L, \quad x_i > L$$

$$\begin{cases} \theta_{1i,j-1} = \theta_{1i,j+1} \\ Y_{i,j-1} = Y_{i,j+1} \\ \theta_{2i,j-1} = \theta_{2i,j+1} \end{cases} \quad i = 1, 2 \dots Nx, \quad j = Ny$$

- En la salida del fluido 1 y entrada del fluido 2

$$\begin{cases} \theta_{1i+1,j} = \theta_{1i-1,j} \\ Y_{i+1,j} = Y_{i-1,j} \\ \theta_{2i,j} = 0 \end{cases} \quad i = Nx, \quad j = 1, 2 \dots Ny$$

- En la entrada del fluido 1 y salida del fluido 2

$$\begin{cases} \theta_{1i,j} = 0 \\ Y_{i,j} = 0 \\ \theta_{2i-1,j} = \theta_{2i+1,j} \end{cases} \quad i = 1, \quad j = 1, 2 \dots Ny$$

4.5.3. Difusión numérica

La difusión numérica es un fenómeno inherente a toda aproximación de ecuaciones en derivadas parciales por medio de series de Taylor, debido a que en cualquier aproximación existe un error de truncamiento, que dependiendo del número de puntos que se utilicen y el orden de la derivada, será de mayor o menor orden. Ahora, vamos a realizar un análisis sobre el carácter difusivo/dispersivo que induce toda discretización en diferencias finitas, y tratar de evaluar su efecto sobre la precisión de forma cualitativa.

Si nos referimos a las expansiones de las series de Taylor mostradas previamente en (5)-(6), y sustituyendo en (11) tenemos que la ecuación que realmente estamos resolviendo para θ_1 es

$$\begin{aligned} u_1(y_1) \left(\frac{\partial \theta_1}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{3} \frac{\partial^3 \theta_1}{\partial x^3} \right) \\ = \frac{1}{Pe^2} \left(\frac{\partial^2 \theta_1}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^2}{12} \frac{\partial^4 \theta_1}{\partial x^4} \right) + \left(\frac{\partial^2 \theta_1}{\partial y_1^2} + \frac{(\Delta y)^2}{12} \frac{\partial^4 \theta_1}{\partial y_1^4} \right) + d\omega_0 + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (23)$$

Si nos quedamos con los términos que inducen errores de mayor orden, la ecuación previa se puede describir como

$$u_1(y_1) \frac{\partial \theta_1}{\partial x} = \underbrace{\frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial y_1^2} + d\omega_0}_{\text{Ecuación}} \underbrace{- \frac{\partial^3 \theta_1}{\partial x^3} \frac{u_1(y_1)(\Delta x)^2}{3} + \frac{\partial^4 \theta_1}{\partial x^4} \frac{(\Delta x)^2}{12Pe^2} + \frac{\partial^4 \theta_1}{\partial y_1^4} \frac{(\Delta y)^2}{12}}_{\text{Términos adicionales}}$$

Como se puede observar, debido al hecho de discretizar la ecuación (11) surgen términos adicionales. Se pueden ver los de mayor importancia, que son los que provocan errores en la precisión del orden de $O(\Delta x^2, \Delta y^2)$. Estos términos adicionales incluyen una derivada de tercer orden, que surge de la discretización *upwind* y dos términos, que son derivadas de cuarto orden, relativos a la aproximación por diferencias centradas de orden 2 de las derivadas segundas. Debido al hecho de que las derivadas de orden impar inducen efectos dispersivos y que las derivadas de orden par inducen efectos difusivos se puede concluir que la ecuación que realmente se está resolviendo tendrá un carácter difusivo en comparación con la original, a la vez que se inducen unos efectos ligeramente dispersivos.

Los efectos difusivos afectarán directamente en la precisión de la solución numérica, pero en casos donde existen grandes gradientes puede ayudar a la convergencia, ya que mitiga los efectos de posibles picos, por lo que en ocasiones incluso se inducen efectos difusivos para evitar saltos muy bruscos. Por el contrario un carácter dispersivo puede llevar a la divergencia, ya que pueden surgir picos que alteren en exceso la solución. Para evitar los efectos indeseables que produce la dispersión lo que se ha hecho es imponer la condición siguiente tras cada iteración

$$\text{si } Y_1 < 0 \longrightarrow Y_1 = 0$$

Con esta condición nos aseguramos que no haya picos negativos de fracción másica, lo que llevaría a velocidades de reacción también negativas. Para afrontar el carácter difusivo lo que se puede hacer es aumentar la precisión refinando la malla.

Para evaluar en nuestro caso si afecta mucho la dispersividad numérica se analiza cuánto vale el mínimo de Y_1 , y generalmente tiene valores despreciables, aunque en algún caso se han observado valores del orden 10^{-4} , lo cual no es excesivo, pero aún así aplicando la condición mostrada se evita este error.

En la Figura 14 se muestra un perfil de la velocidad de reacción ω_0 cerca de la pared superior a lo largo del canal, que es donde son esperables unos gradientes más grandes, calculado a partir de mallas computacionales con distintas resoluciones. En el primer caso la distancia entre nodos es uniforme en toda la malla y es $\Delta x = 0.03$, en el segundo también se tiene una malla uniforme con $\Delta x = 0.01$ y se le ha aplicado la condición antes expuesta de si la fracción másica es menor que cero se la hace igual a cero, y en el caso de más a la derecha el cálculo se ha realizado haciendo una transformación de coordenadas, que aparece descrita con detalle en el Apéndice A, donde se hace uso de una malla computacional no uniforme donde cerca de la llama se tienen valores de $\Delta x \sim 0.002$. Como se explica con más detalle en el Apéndice, la transformación de coordenadas resulta muy útil para ahorrar tiempo de cálculo, ya que se concentran los nodos en la zona donde más interesa, que es alrededor de la llama, dando menos importancia al resto del dominio, y nos permite alcanzar resoluciones de la malla física muy altas en la llama haciendo uso de muchos menos nodos que usando una malla uniforme. Volviendo a la Figura 14 se aprecia el efecto de la dispersividad donde Δx es mayor, observando picos negativos de la velocidad de reacción. Aumentando la resolución y aplicando la condición de fracción másica no nula se ve como los picos negativos han desaparecido, y el perfil tiene una forma más suave. Por último en el caso con transformación de coordenadas se ve como además de desaparecer los picos negativos se tiene una forma aún más redondeada.

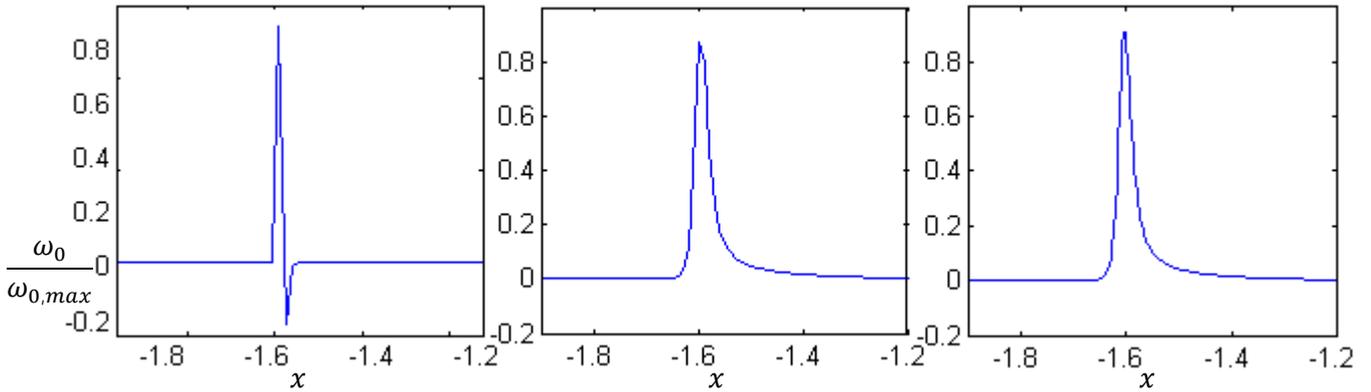


Figura 14: A la izquierda se tiene el perfil de la velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max}$ con $\omega_{0,max} = 28.3$, cerca de la pared superior a lo largo del canal para $d = 1, Pe = 10, h_2/h_1 = 0.5, m_2/m_1 = 1$, calculado con una malla uniforme con $\Delta x = 0.03$. En el centro se tiene el perfil de $\omega_0/\omega_{0,max}$ con $\omega_{0,max} = 26.45$, a la misma altura y con los mismos parámetros que en el primer caso, calculado con una malla uniforme con $\Delta x = 0.01$ y aplicando la condición de fracción másica no negativa. Más a la izquierda se tiene el mismo perfil de $\omega_0/\omega_{0,max}$ con $\omega_{0,max} = 26.38$ para los mismos parámetros calculado a partir de una malla no uniforme y $\Delta x \approx 0.002$ en torno a $x = -1.5$.

Para la temperatura en el canal 2 y la fracción másica el análisis es análogo.

4.5.4. Formación de los sistemas de ecuaciones lineales

Una vez definidas todas las ecuaciones con sus correspondientes condiciones de contorno, y que se han discretizado conforme a la descripción previamente expuesta, se procede a construir los sistemas de ecuaciones lineales, cuyas incógnitas son la temperatura y fracción másica del fluido 1 y la temperatura en el fluido 2 en todo el dominio.

Los tres sistemas de ecuaciones serán de la forma

$$\begin{cases} A\theta_1 = b \\ A_1Y = b_1 \\ A_2\theta_2 = b_2 \end{cases} \quad (24)$$

Donde las dimensiones de las matrices $A, A_1,$ y A_2 serán $[N_x \times N_y] \times [N_x \times N_y]$ y las dimensiones de los vectores de términos independientes serán $[N_x \times N_y]$. Con el objetivo de hacer que las diagonales de las matrices se encuentren lo más cerca posible de la diagonal principal, la numeración de los nodos se ha hecho por columnas utilizando como contador $n = j + (i - 1) \cdot N_y$. Sustituyendo en las ecuaciones ya discretizadas y escribiéndolas de la forma $Ax = b$ quedaría

- Para la temperatura en el canal 1

$$u_{1n} \frac{3\theta_{1n} - 4\theta_{1n-Ny} + \theta_{1n-2Ny}}{2\Delta x} - \frac{1}{Pe^2} \frac{\theta_{1n+Ny} - 2\theta_{1n} + \theta_{1n-Ny}}{\Delta x^2} - \frac{\theta_{1n+1} - 2\theta_{1n} + \theta_{1n-1}}{\Delta y^2} = d\omega_{0n} \quad (25)$$

- Para la fracción másica Y

$$u_{1n} \frac{3Y_{1n} - 4Y_{1n-Ny} + Y_{1n-2Ny}}{2\Delta x} - \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{Pe^2} \frac{Y_{1n+Ny} - 2Y_{1n} + Y_{1n-Ny}}{\Delta x^2} + \frac{Y_{1n+1} - 2Y_{1n} + Y_{1n-1}}{\Delta y^2} \right) - d \frac{\beta^2}{2Leu_p} Y_{1n} \cdot \exp\left(\beta \frac{\theta_{1n} - 1}{1 + \gamma(\theta_{1n} - 1)}\right) = 0 \quad (26)$$

- Para la temperatura en el canal 2

$$-u_{1n} \frac{-3\theta_{2n} + 4\theta_{2n+Ny} + \theta_{2n+2Ny}}{2\Delta x} - \frac{1}{Pe^2 h_1} \frac{h_2 \theta_{2n+Ny} - 2\theta_{2n} + \theta_{2n-Ny}}{\Delta x^2} - \frac{1}{h_2/h_1} \frac{\theta_{2n+1} - 2\theta_{2n} + \theta_{2n-1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (27)$$

Se puede observar como para la temperatura 1 el vector con los términos independientes vale $b = d\omega_{0n}$, lo que es el efecto de la velocidad de reacción, mientras que tanto para la fracción másica como para la temperatura 2 el valor para este vector es nulo $b_1 = b_2 = 0$, ya que en la fracción másica el efecto de la velocidad de reacción está incluido dentro de la matriz, al ser la velocidad de reacción directamente proporcional a la fracción másica, y en la temperatura 2 no hay velocidad de reacción al no haber reacción química en el canal 2.

4.5.5. Resolución de los sistemas de ecuaciones lineales

El procedimiento para resolver los sistemas de ecuaciones se puede ver de forma resumida en el siguiente diagrama.

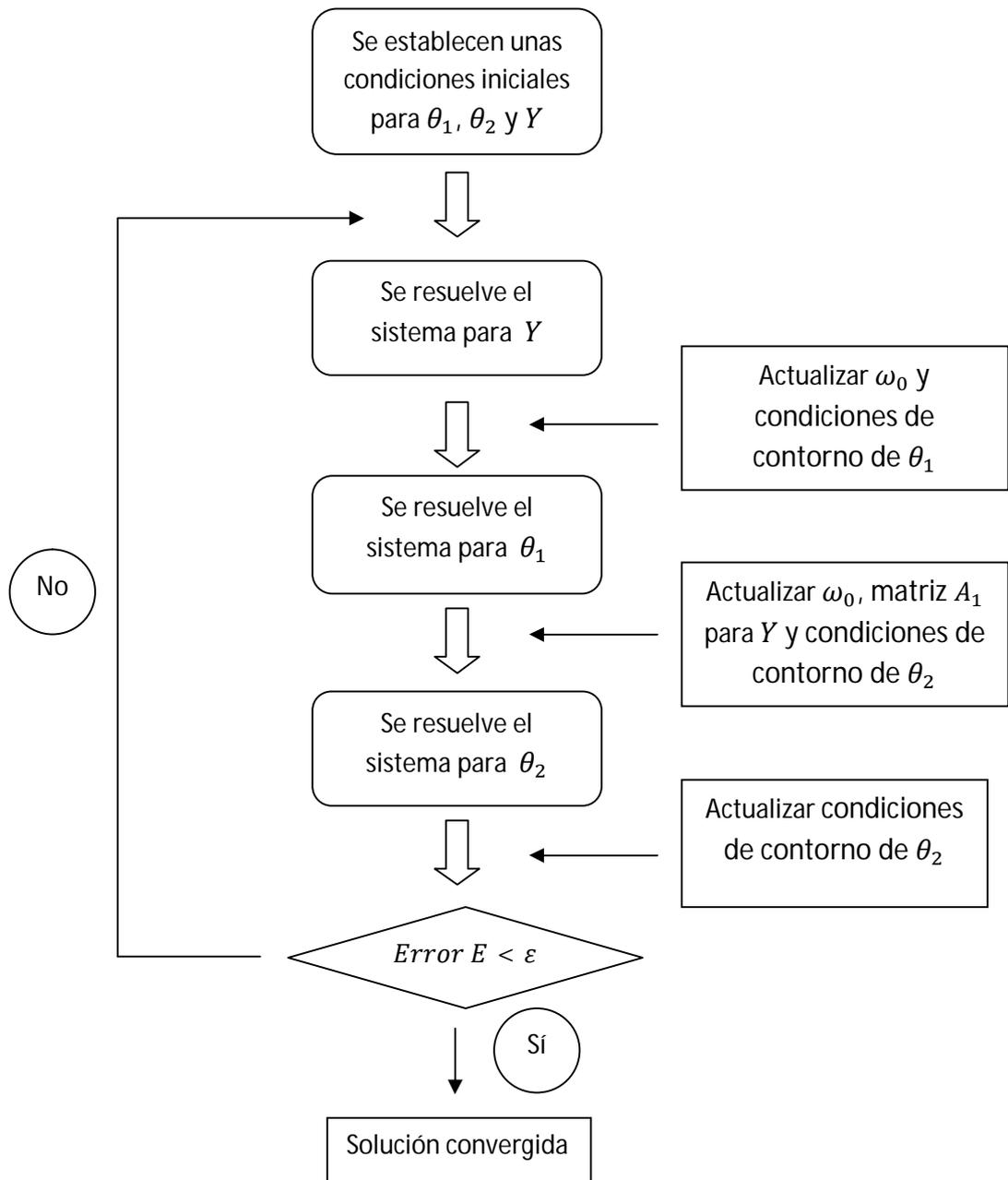


Figura 15: diagrama de flujo con los pasos para la resolución de los sistemas de ecuaciones simultáneos

De manera análoga a como se resolvía el problema para un solo canal sin recirculación de calor, se resuelve cada uno de los tres sistemas de ecuaciones por el método iterativo de Gauss-Seidel. Como se observa en el diagrama, en el primer paso se definen las condiciones iniciales para las tres incógnitas, que son las que se utilizarán para la primera iteración. Estas condiciones iniciales serán

$$\theta_1 = 0.8 \cdot \frac{1 + \tanh\left(\frac{x-x_0}{\delta}\right)}{2}$$

$$\theta_2 = 0.8 \cdot \frac{1 - \tanh\left(\frac{x-x_0}{\delta}\right)}{2} \quad (28)$$

$$Y_1 = \frac{1 + \tanh\left(\frac{x-x_0}{\delta}\right)}{2}$$

Al igual que en un solo canal, estas condiciones iniciales se asemejan al perfil de temperaturas y de la fracción másica a lo largo del canal para facilitar la convergencia. A partir de aquí se entra en un bucle en el que se van resolviendo los sistemas de forma iterativa para la fracción másica y la temperatura 1 y 2. Mientras, se van actualizando las condiciones de contorno para la temperatura 1 y 2 por medio de los vectores de términos independientes b y b_2 a la vez que se recalcula la velocidad de reacción contenida en la matriz para la fracción másica y también en el vector b . Para verificar la precisión con que se están realizando los cálculos al término de cada iteración se comprueba el valor del error E y se continuará iterando hasta que $E < \varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$. El error E se define como $E = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)$ siendo $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ las tres condiciones definidas en la ecuación (22) resultantes de integrar el flujo en la dirección axial y transversal.

Si no se cumple la condición anterior se itera de nuevo hasta que se alcanza, o hasta un número de iteraciones máximo ite_{max} en el que si no se ha alcanzado la convergencia se considera que no existe solución válida aparte de la trivial.

Se ha monitorizado el error ε , representándose su evolución según aumentamos el número de iteraciones en la Figura 16, alcanzándose para este la condición de convergencia para un número de iteraciones $ite \sim 1500$.

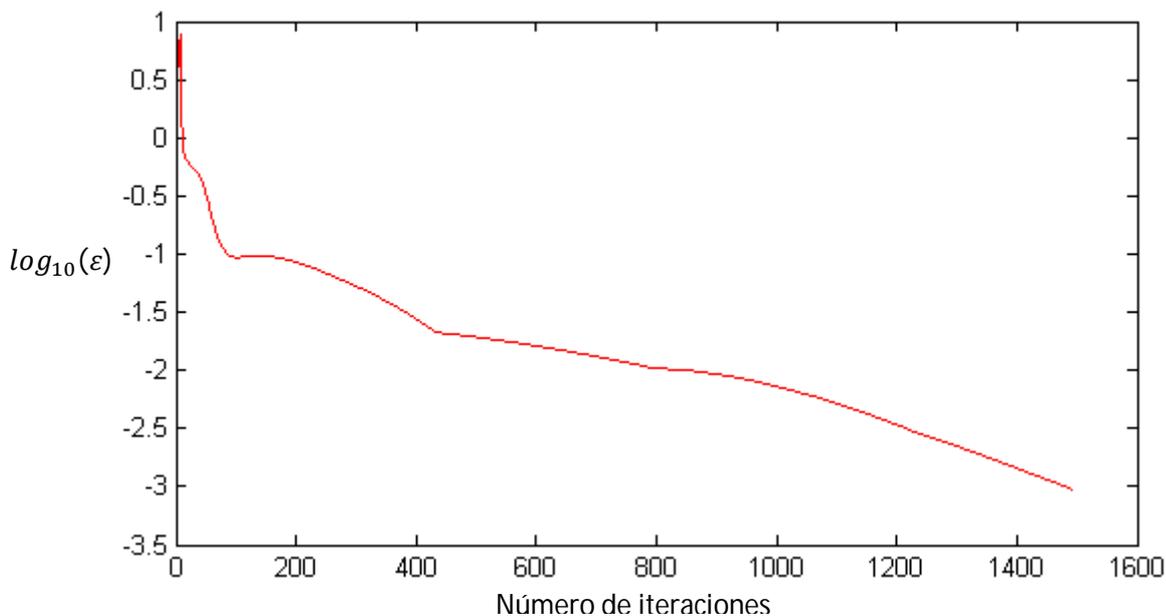


Figura 16: Error $E = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)$ frente al número de iteraciones. Se observa cómo se alcanza la condición de convergencia $E < \varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$ para $ite=1500$

El resultado de este cálculo se muestra a continuación en la Figura 17 en forma de isotermas para la temperatura en el canal 1 y la temperatura en el canal 2.

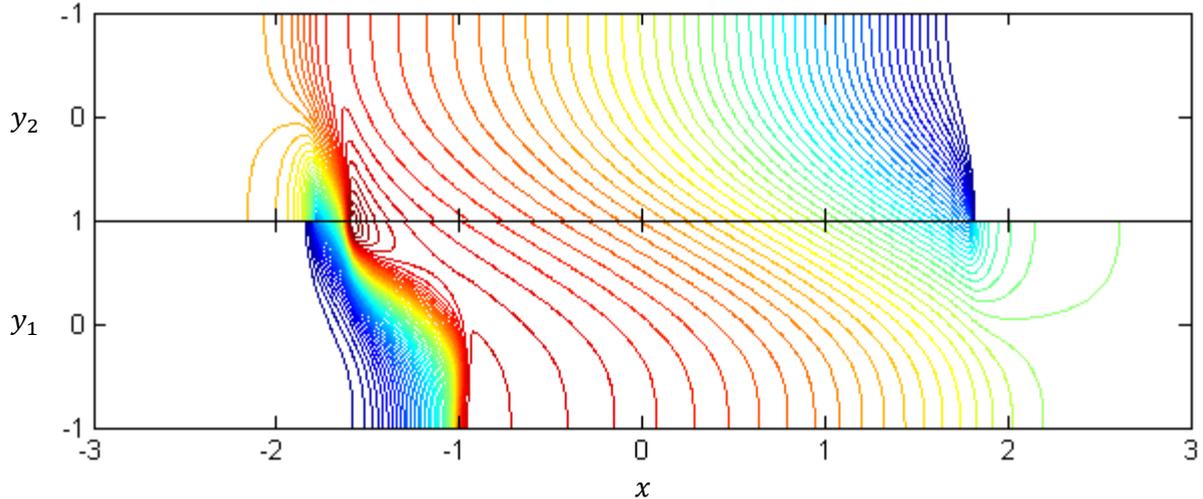


Figura 17: Isotermas para la temperatura en el canal 1 $\theta_1/\theta_{1,max} \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1/\theta_{1,max} = 0.02$, $\theta_{1,max} = 1.167$ y para la temperatura en el canal 2 $\theta_2/\theta_{2,max} \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_2/\theta_{2,max} = 0.02$, $\theta_{2,max} = 1.162$. El valor de la longitud L donde se permite el intercambio de calor es $L = 1.8$, con un número de Damköhler $d = 1$ y $m_2/m_1 = 1$, $h_2/h_1 = 0.5$, $Pe = 10$.

4.6. Temperatura y extensión de la llama

Tanto el fluido 1 como el fluido 2 están inicialmente fríos cuando entran en la zona de intercambio de calor. La reacción de combustión que tiene lugar en el canal inferior introduce una fuente de energía que aumentará la temperatura en el canal. Parte de esta energía se transmitirá al canal superior donde fluye el fluido inerte, y una cierta proporción de esta energía le será devuelta al fluido 1 por conducción de calor.

El proceso inicial de calentamiento de ambos fluidos se puede observar que ocurre en una región pequeña en los límites de la zona donde está permitido el intercambio de calor $x = \pm L$. La reacción química empieza cuando la temperatura es suficientemente alta para hacer que la velocidad de reacción dada en la ecuación (3) sea de orden unidad. A partir de aquí se establece la llama a $x = x_f(y)$ donde x_f indica la situación axial de la llama a la cual la temperatura alcanza su máximo. Este valor generalmente será función de la coordenada transversal. Se puede ver en varios ejemplos a continuación la diferencia entre donde están situados ambos extremos de la llama $\Delta x_f = x_f(y_1 = -1) - x_f(y_1 = 1)$, permitiéndonos medir de esta forma la extensión de la misma.

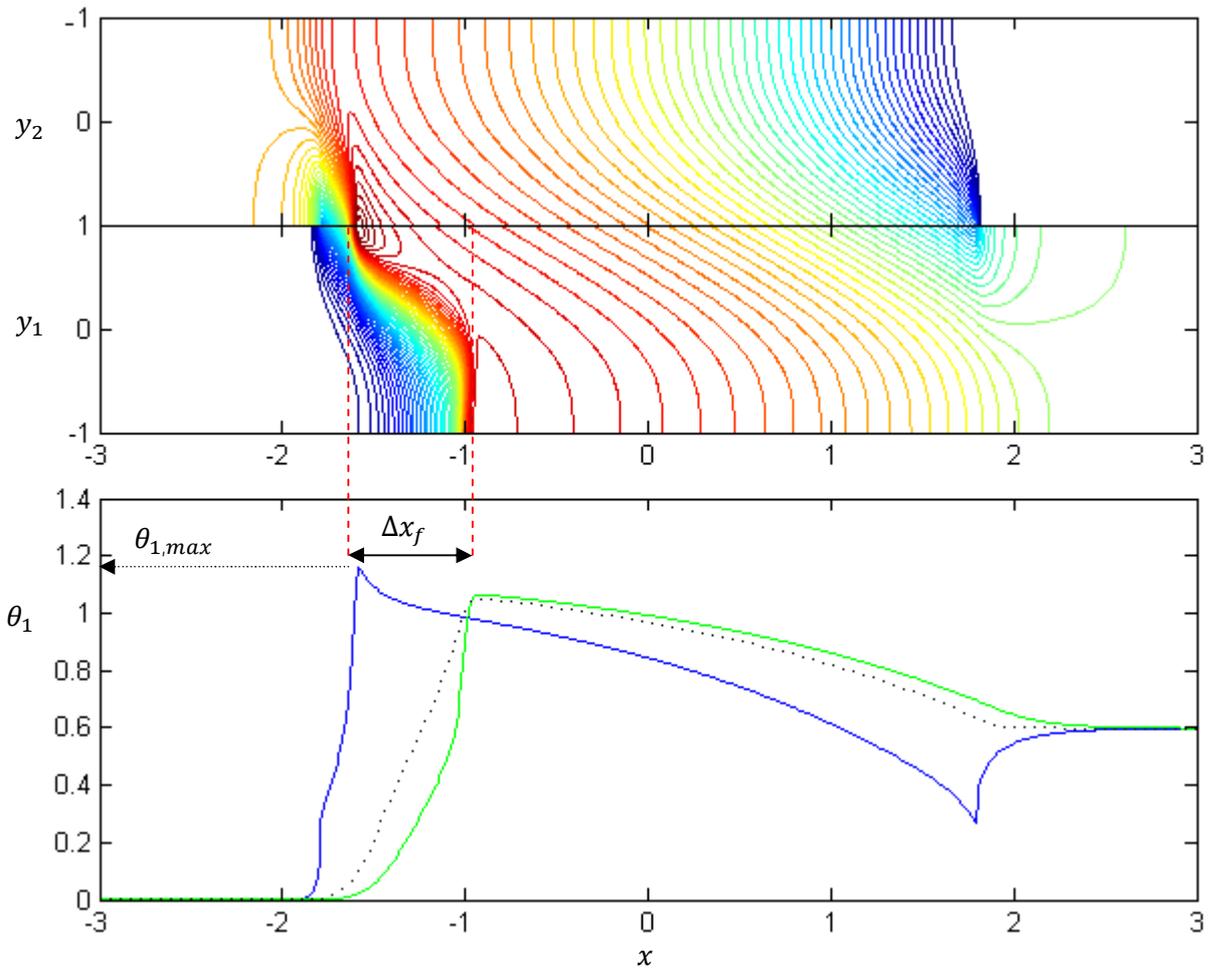


Figura 18: En la gráfica superior se muestran las isothermas que previamente se podían ver en la Figura 17 con el objetivo de mostrar de forma más clara el estiramiento de la llama Δx_f , que es la distancia entre el punto en que la llama toca la pared superior y el punto en que toca la pared inferior. En la gráfica inferior se muestran el perfil de temperaturas θ_1 en la pared superior (azul), pared inferior (verde), y en el centro del canal (puntos negros).

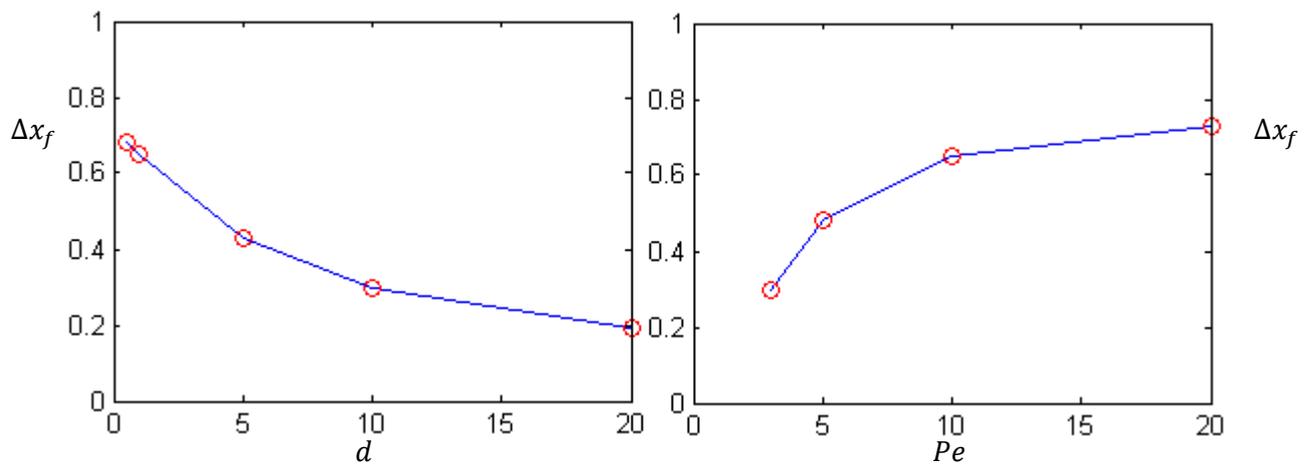


Figura 19: A la izquierda está representado el estiramiento de la llama Δx_f frente a d para $d = (0.5, 1, 5, 10, 20)$. A la derecha se representa el estiramiento de la llama Δx_f frente a Pe para $Pe = (3, 5, 10, 20)$.

El calor liberado en la reacción química aumenta la temperatura del fluido 1 bien por encima de la unidad, lo que quiere decir que se alcanzan temperaturas superiores a la temperatura adiabática de la llama, tal como se puede observar en la Figura 18, donde están representadas las temperaturas en la pared adiabática $y_1 = -1$ (color verde), en la pared conductora de calor $y_1 = 1$ (color azul), y en la mitad del canal $y_1 = 0$ (puntos negros). En la Figura 19 se puede observar la evolución de Δx_f en función del número de Peclet y también en función de d . En esta evolución se ve como Δx_f disminuye cuando aumenta d , a la vez que la temperatura máxima ($\theta_{max} = 1.222$) es mayor cuando d tiene el valor más bajo ($d = 0.5$) y en cambio para $d = 20$ la temperatura máxima en la pared superior no alcanza la temperatura adiabática ($\theta_{max} = 0.99$). Como se anticipaba, los canales muy estrechos requieren de altas temperaturas para mantener la combustión, mientras que para valores más altos de d , temperaturas poco por encima e incluso inferiores a la unidad son suficientes, como por ejemplo para $d = 20$ donde la temperatura no llega a 1. En la Figura 20 se muestran los isocontornos de la velocidad de reacción para llamas calculadas variando la altura del canal d . La llama se vuelve más delgada según el número de Damköhler aumenta, acercándose al límite de la zona con intercambio de calor debido a la reducción en la velocidad de propagación de la llama, que es una consecuencia directa de la reducción de temperatura. También se aprecia como los valores máximos de la velocidad de reacción se acumulan cerca de la pared con intercambio de calor, que es precisamente donde se alcanzan las temperaturas más altas.

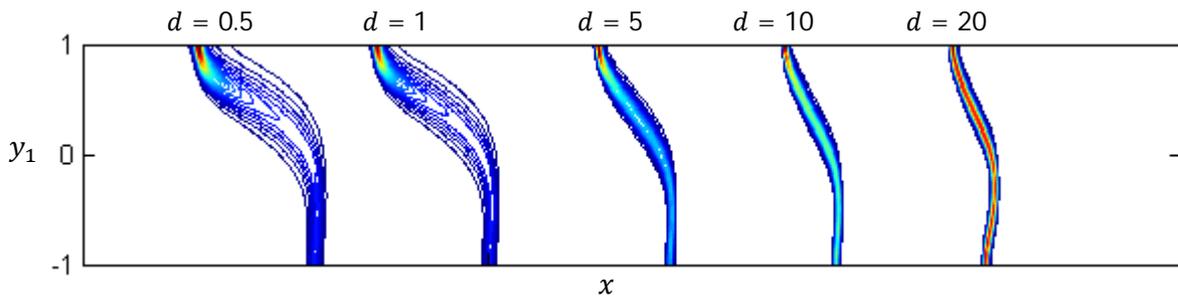


Figura 20: isocontornos de velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max} \in (0, 1)$, $\Delta \omega_0/\omega_{0,max} = 0.025$ para $Pe = 10$, $m_2/m_1 = 1$, $h_2/h_1 = 0.5$ y $L = 1.8$. Los valores máximos de la velocidad de reacción son $\omega_{0,max} = (42.74, 26.45, 6.85, 4.11, 2.14)$ para $d = (0.5, 1, 5, 10, 20)$.

En la Figura 21 se ve cómo evolucionan, respectivamente, la temperatura y la velocidad de reacción máxima en el canal 1 según se va haciendo más estrecho. Como se viene mencionando se comprueba como gracias a la recirculación de calor, estas temperaturas máximas superan la temperatura adiabática de llama y aumentan considerablemente cuando se reduce d . Este aumento de la temperatura viene acompañado de un aumento en la velocidad de reacción, ya que esta última depende de forma exponencial de la temperatura (3).

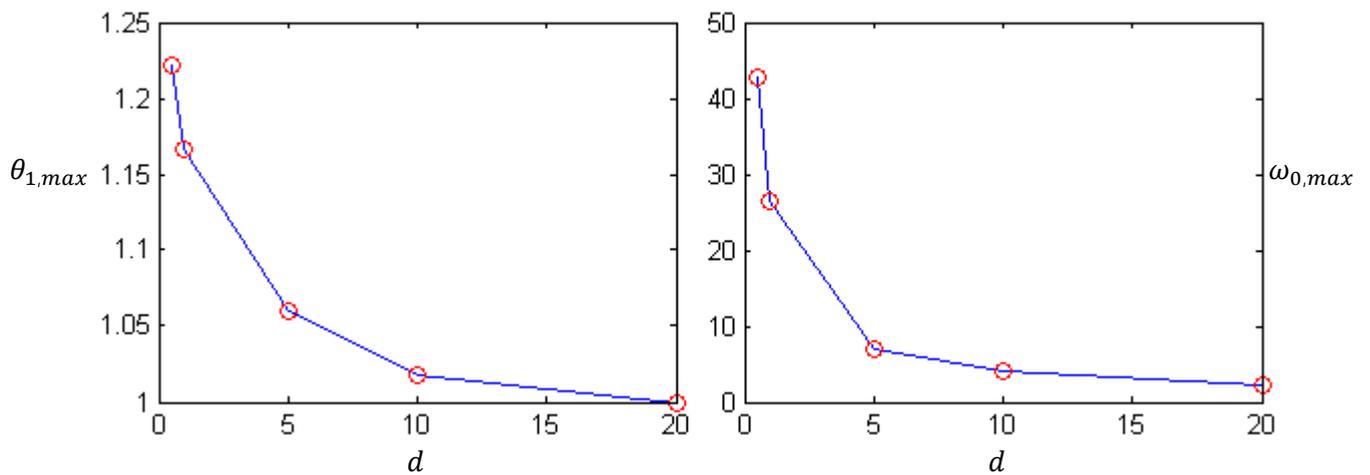


Figura 21: A la izquierda se ve la evolución de la temperatura máxima alcanzada en el canal $\theta_{1,max}$ en función de d para $d = (0.5, 1, 5, 10, 20)$. En la gráfica de la derecha se muestra la velocidad de reacción máxima $\omega_{0,max}$ para los mismos valores de d .

En el estudio anterior se ha mantenido el número de $Pe = 10 = cte$ para todos los casos. Ahora vamos a ver cómo influye en las temperaturas y en la velocidad de reacción, para $d = 1, L = 1.8$. Se ha resuelto el problema para valores de $Pe = (3, 5, 10, 20)$ y se evalúa la temperatura y la velocidad de reacción máximas alcanzadas en función del número de Peclet. Se comprueba cómo según Pe aumenta manteniendo $d = 1$, la temperatura máxima en la pared aumenta también, al igual que la velocidad de reacción. La razón de que ocurra este aumento en la temperatura se debe a un aumento en la transmisión de calor del fluido 2 al 1, ya que la transmisión de calor ocurrirá principalmente por medio de convección, al estar divididos los términos viscosos por el cuadrado de Pe y disminuir mucho según este aumenta.

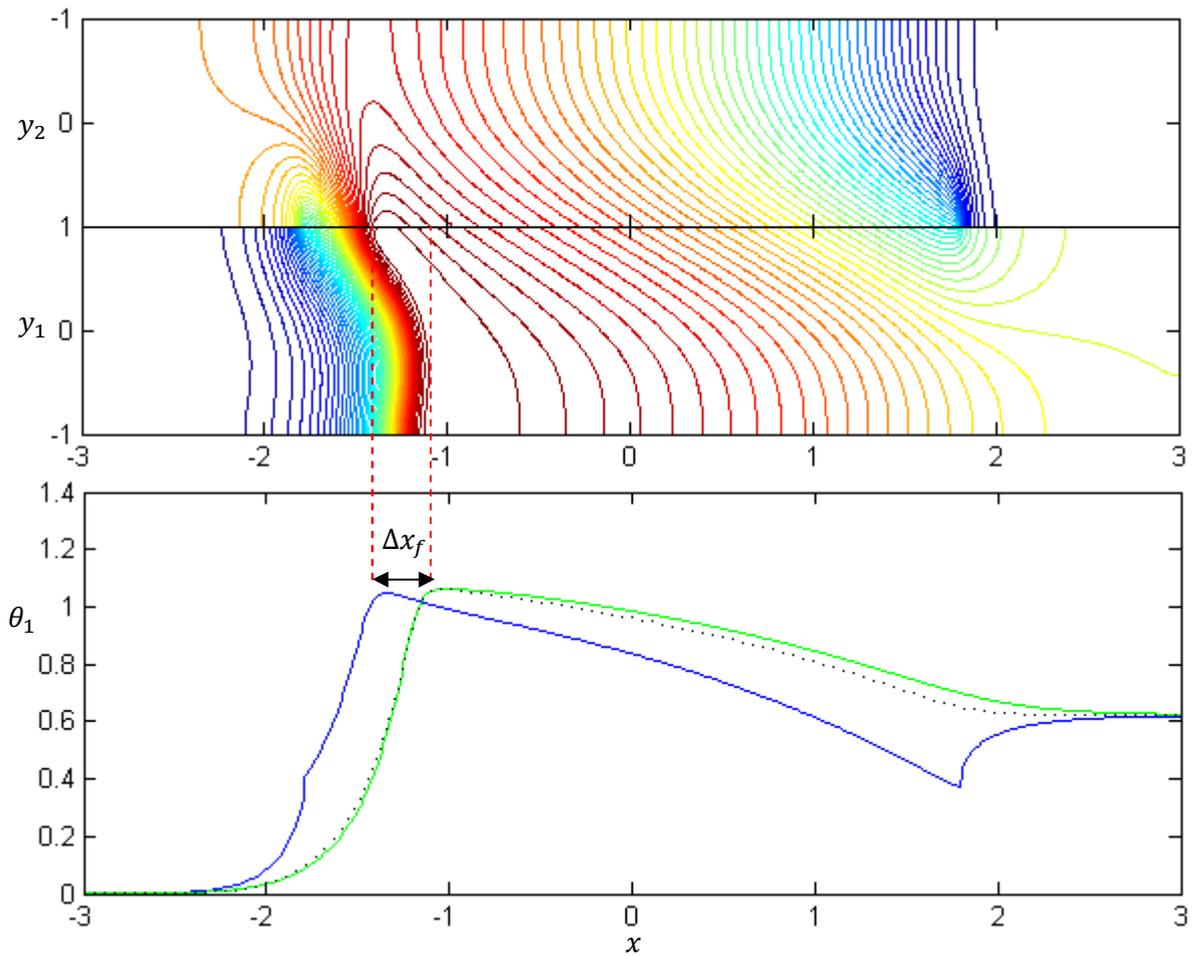


Figura 22: En la gráfica superior se muestran las isotermas para la temperatura $\theta_1/\theta_{1,max} \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_1/\theta_{1,max} = 0.02$, $\theta_{1,max} = 1.06$ y para la temperatura en el canal 2 $\theta_2/\theta_{2,max} \in (0, 1)$ con $\Delta\theta_2/\theta_{2,max} = 0.02$, $\theta_{2,max} = 1.05$. El valor de la longitud L donde se permite el intercambio de calor es $L = 1.8$, con un número de Damköhler $d = 1$ y $m_2/m_1 = 1$, $h_2/h_1 = 0.5$, $Pe = 3$. En la gráfica inferior se muestran el perfil de temperaturas θ_1 en la pared superior (azul), pared inferior (verde), y en el centro del canal (puntos negros).

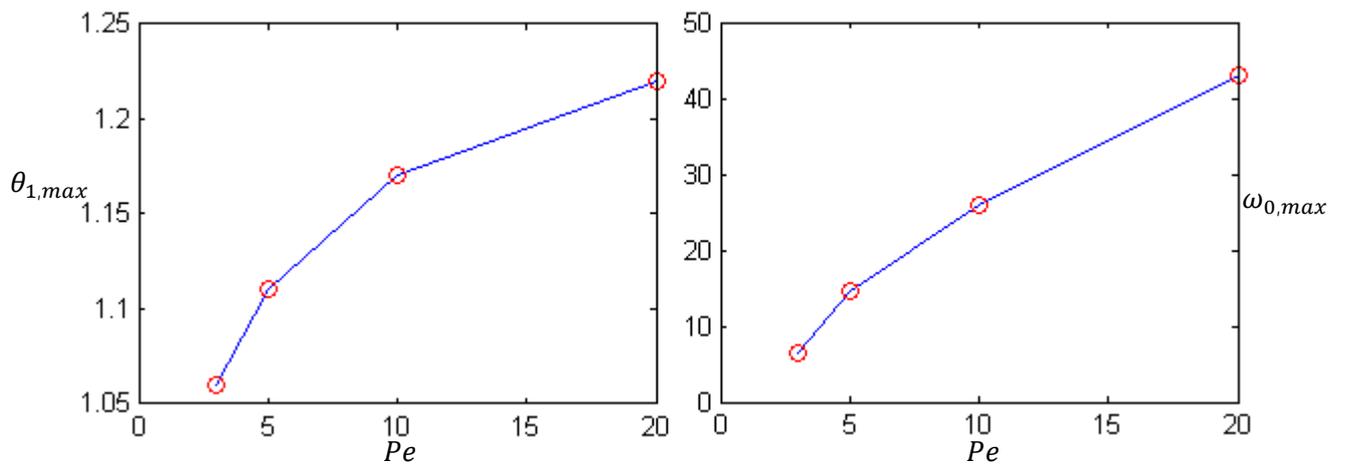


Figura 23: A la izquierda se ve la evolución de la temperatura máxima alcanzada en el canal 1 $\theta_{1,max}$ en función de Pe para $Pe = (3, 5, 10, 20)$. En la gráfica de la derecha se muestra la velocidad de reacción máxima $\omega_{0,max}$ para los mismos valores de Pe .

Abajo en la Figura 24 se muestran las velocidades de reacción para distintos valores de Pe y número de Damköhler constante e igual a la unidad. Se aprecia como al aumentar Pe los valores máximos de la velocidad de reacción en la combustión se acumula cerca de la pared superior, siendo cada vez más delgada tanto en la pared inferior como también en la superior. Este fenómeno se debe a como se explica anteriormente, al aumentar Pe la transmisión de calor por difusión en la dirección axial disminuye hasta hacerse prácticamente despreciable al ser los términos difusivos muy bajos, haciendo de la transmisión de calor por convección la única forma de transmisión en esta dirección. Al ser la velocidad nula en las paredes debido a la naturaleza del flujo laminar, se tendrá que para $Pe \gg 1$ la transmisión de calor en las paredes en la dirección axial será despreciable, haciendo que la velocidad de reacción sea extremadamente delgada.

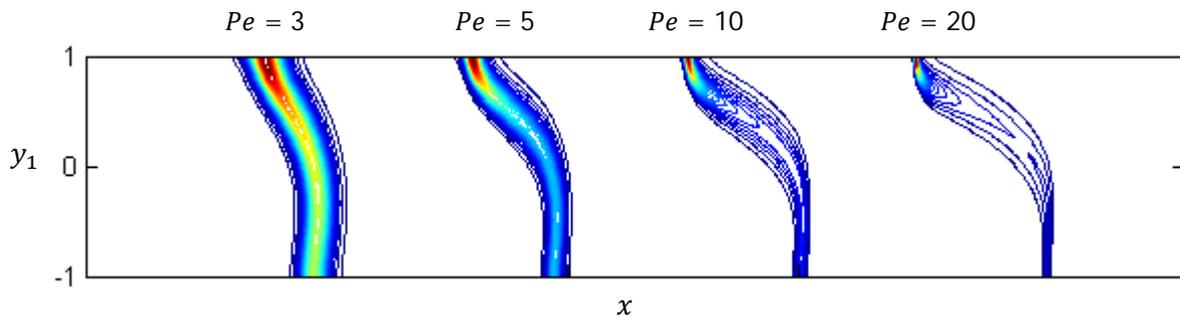


Figura 24: isocontornos de velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max} \in (0, 1)$, $\Delta\omega_0/\omega_{0,max} = 0.025$ para $d = 1, m_2/m_1 = 1, h_2/h_1 = 0.5$ y $L = 1.8$. Los valores máximos de la velocidad de reacción son $\omega_{0,max} = (7.20, 14.10, 26.46, 42.60)$ para $Pe = (3, 5, 10, 20)$.

Capítulo 5

Extinción de la llama en canales estrechos

5.1. Introducción

Se ha ido remarcando en varios puntos anteriormente la dificultad de mantener la combustión en canales estrechos debido al efecto que producen las pérdidas de calor. De igual manera se han comentado distintos enfoques para minimizar estos efectos, como el que se aplica en el problema que se está resolviendo, recircular el calor de los gases de escape, con el objetivo de extender la combustión en sistemas más pequeños.

Para estudiar el efecto de la recirculación de calor en la extinción de llamas pobres de premezcla, se puede ver representado en las Figura 25, Figura 26 y Figura 27 el rango de la relación de velocidades m_2/m_1 para el cual la combustión estacionaria es posible en función de la relación de alturas de los dos canales h_2/h_1 para valores distintos L de la zona donde se permite el intercambio de calor. También se va modificando el valor de d entre gráficas para observar la influencia de la altura del canal.

5.2. Procedimiento. Método de continuación de *Euler-Newton*

Para poder representar los límites en los que se puede tener una combustión estacionaria, lo que nos tenemos que hallar en realidad es el rango para la relación de velocidades $m_2/m_1 \in [m_{21,min}, m_{21,max}]$ dentro del cual la combustión es posible, lo que quiere decir que fuera del mismo la combustión no puede existir. Esto se traduce en que es imposible encontrar una solución $m_2/m_1 < m_{21,min}$ o $m_2/m_1 > m_{21,max}$.

Para encontrar estos valores limitantes de la relación de velocidades, se han integrado numéricamente las ecuaciones (11)(12)(13) tal como se describe en los puntos anteriores. Tanto $m_{21,min}$ como $m_{21,max}$ se definen como las relaciones de velocidad m_2/m_1 para las cuales las ecuaciones de conservación no tienen solución aparte de la solución trivial $\theta_1 = \theta_2 = 1 - Y = 0$. La técnica utilizada para obtener estos valores de forma numérica cambia la relación de velocidades m_2/m_1 en pequeños incrementos Δm_{21} hasta que no se encuentra solución. Para reducir el tiempo computacional, se ha usado un método de continuación de Euler-Newton, en el que el valor inicial para el siguiente cálculo se estima a partir de valores calculados previamente. En particular, para hallar el límite superior, primero se discretiza uniformemente h_2/h_1 , y se calculan los dos primeros límites para h_2/h_1 (1) y h_2/h_1 (2) utilizando como valor inicial de m_2/m_1 un valor para el que es conocido que existe combustión estable y a partir de ahí se incrementa en valores pequeños m_2/m_1 hasta que no existe solución aparte de la trivial. Cuando ya son conocidos los valores de $m_{21,max}$ para h_2/h_1 (1) y h_2/h_1 (2), desde este momento en adelante se estimará el valor inicial de $m_{21,max}$ de manera que

$$m_{21,max}(h_2/h_1 + \Delta h_2/h_1) = m_{21,max}(h_2/h_1) + dh \cdot \frac{dm}{dh} \quad (29)$$

Donde

$$\frac{dm}{dh} = \frac{m_{21,max}(h_2/h_1) - m_{21,max}(h_2/h_1 - \Delta h_2/h_1)}{\Delta h_2/h_1} \quad (30)$$

De esta última definición viene la necesidad de calcularse los dos primeros valores de $m_{21,max}$ sin poderse estimar previamente, ya que se necesita conocer al menos los dos puntos previos al que se está calculando para poder calcular la pendiente, y a partir de ahí estimar el siguiente valor. De una manera análoga se construye una expresión para estimar los valores iniciales del límite inferior $m_{21,min}$ quedando

$$m_{21,min}(h_2/h_1 + \Delta h_2/h_1) = m_{21,min}(h_2/h_1) + dh \cdot \frac{dm}{dh} \quad (31)$$

Siendo

$$\frac{dm}{dh} = \frac{m_{21,min}(h_2/h_1) - m_{21,min}(h_2/h_1 - \Delta h_2/h_1)}{\Delta h_2/h_1} \quad (32)$$

Se procederá de igual manera con las temperaturas θ_1 y θ_2 y con la fracción másica Y interpolando el valor de cada una de ellas para la siguiente iteración, siendo el valor de θ_1 , θ_2 y Y en la siguiente iteración $\theta_1^{n+1} = \theta_1^n + \Delta\theta_1$, $\theta_2^{n+1} = \theta_2^n + \Delta\theta_2$ y $Y^{n+1} = Y^n + \Delta Y$, respectivamente. Esta aproximación nos ahorrará tiempo de cálculo al utilizar como condición inicial en la siguiente iteración unos valores muy próximos a la solución real, reduciendo el número de iteraciones total para llegar a la convergencia. Procediendo de esta manera θ_1 , θ_2 y Y en la siguiente iteración se aproximarán como

$$\begin{aligned} \theta_1^{n+1} &= \theta_1^n + \Delta\theta_1 \\ \theta_1(h_2/h_1 + \Delta h_2/h_1) &= \theta_1(h_2/h_1) + dh \cdot \frac{d\theta_1}{dh} \\ \theta_2(h_2/h_1 + \Delta h_2/h_1) &= \theta_2(h_2/h_1) + dh \cdot \frac{d\theta_2}{dh} \\ Y(h_2/h_1 + \Delta h_2/h_1) &= Y(h_2/h_1) + dh \cdot \frac{dY}{dh} \end{aligned} \quad (33)$$

Donde

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dh} &= \frac{\theta_1^n - \theta_1^{n-1}}{\Delta h_2/h_1} \\ \frac{d\theta_2}{dh} &= \frac{\theta_2^n - \theta_2^{n-1}}{\Delta h_2/h_1} \\ \frac{dY}{dh} &= \frac{Y^n - Y^{n-1}}{\Delta h_2/h_1} \end{aligned} \quad (34)$$

Para asegurar una precisión suficiente en el cálculo de $m_{21,max}$ y $m_{21,min}$ se han utilizado valores para el incremento de la relación de velocidades y de la relación de alturas de los canales de $\Delta m_{21} = \Delta h_2/h_1 = 0.01$. Para casos donde el canal es relativamente más ancho, como en $d = 10$, y por tanto existirá combustión para valores críticos de h_2/h_1

mayores, se han utilizado valores de $\Delta h_2/h_1 = 0.05$ ya que sino el tiempo de cálculo aumenta considerablemente.

5.3. Resultados

Siguiendo este procedimiento se ha podido dibujar cómo afecta la relación de alturas de los canales h_2/h_1 y la relación de velocidades m_2/m_1 a la existencia o no de combustión, para distintos valores de la zona donde se permite intercambio de calor L y la altura del canal d . La continuación se termina cuando $m_{21,max} = m_{21,min}$. En este punto se habrá alcanzado la relación de alturas h_2/h_1 máxima crítica, a partir de la cual no se puede encontrar combustión estacionaria. Se puede observar en las distintas gráficas como el rango de m_2/m_1 donde existe combustión se vuelve más pequeño según disminuye d para L constante o se disminuye L para d constante. De manera distinta a lo que ocurría en canales sin recirculación de calor, se comprueba como la combustión se mantiene incluso en canales muy estrechos con tal de que la zona donde se permite el intercambio de calor sea suficientemente larga $L > L_c$. A aquella distancia L en la que la combustión se mantiene, si al disminuirla manteniendo todos los demás parámetros constantes ya no existe combustión estacionaria, se llamará crítica, L_c .

A continuación se va a mostrar el rango de m_2/m_1 dentro del cual existe combustión para una combinación de parámetros dada, y cómo este $m_2/m_1 \in [m_{21,min}, m_{21,max}]$ se hace más extenso según aumenta la anchura del canal. En Figura 25, Figura 26 y Figura 27 se observa la evolución de $m_{21,min}$ y $m_{21,max}$ para distintas anchuras del canal, pudiéndose comprobar cómo este rango de relación de velocidades donde la combustión es posible disminuye notablemente con la anchura.

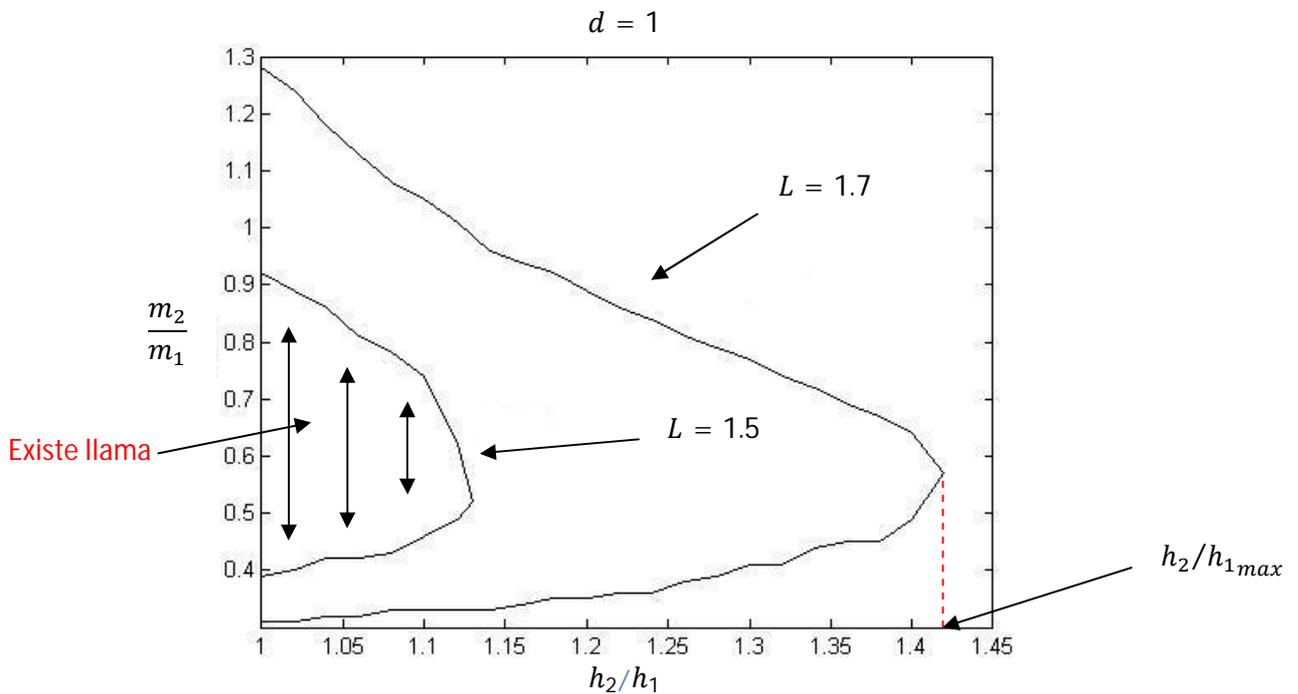


Figura 25: valores limitantes de m_2/m_1 en función de h_2/h_1 para $d = 1$ y $Pe = 10$. A modo de ejemplo se señala el área donde existe combustión para un valor de $L = 1.5$

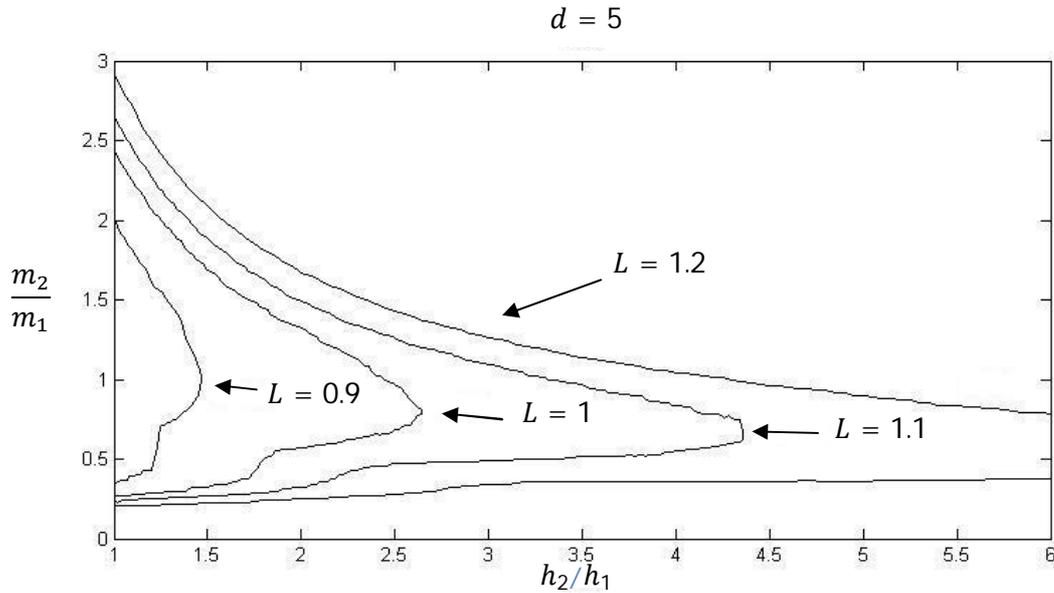


Figura 26: valores limitantes de m_2/m_1 en función de h_2/h_1 para $d = 5$ y $Pe = 10$

Se definirá $h_2/h_{1,max}$ como el valor de la relación de alturas de los canales h_2/h_1 límite a partir del cual es imposible encontrar combustión para un determinado L . En la Figura 25 se puede ver resaltado el valor de $h_2/h_{1,max} = 1.42$ para $L = 1.7$. De igual manera se ve en la Figura 26 que para $L = (0.9, 1, 1.1)$ se tienen valores de $h_2/h_{1,max} = (1.4, 2.7, 4.4)$ mientras que para $L = 1.2$ $h_2/h_{1,max} \rightarrow \infty$ para un pequeño rango de relación de velocidades. Esto tiene mucha importancia, ya que es posible encontrar combustión en un determinado rango de m_2/m_1 para valores infinitamente pequeños de la altura h_1 en comparación con la altura en el canal 2 h_2 .

Por esto se puede concluir que seleccionando de forma correcta los parámetros fluidos y geométricos del problema es posible mantener la combustión para cualquier valor de la relación de alturas de los canales a partir una cierta longitud L .

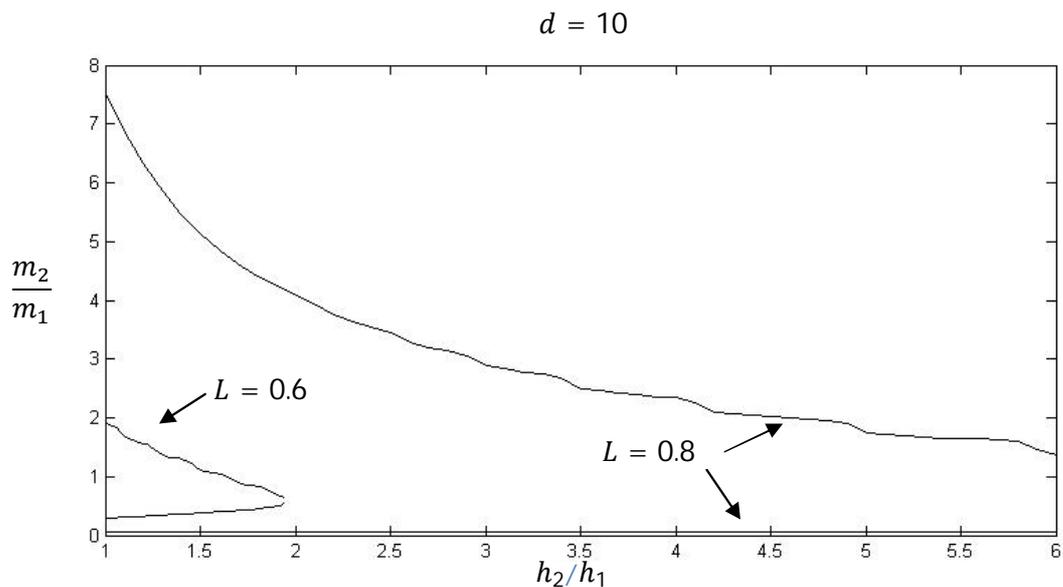


Figura 27: valores limitantes de m_2/m_1 en función de h_2/h_1 para $d = 10$ y $Pe = 10$

En el caso $d = 5$ (Figura (26)) se observa que para $L > 1.1$ $h_2/h_{1max} \rightarrow \infty$, lo que significa que siempre existe combustión para un cierto rango de m_2/m_1 . Para $d = 5$ siempre existirá combustión para valores de relación de las velocidades $m_2/m_1 \in [0.4, 0.7]$. Lo mismo ocurre para $d = 10$, donde a partir de $L > 0.7$ no existe un límite para h_2/h_{1max} que produzca la extinción de la llama. En este caso, para $L = 0.8$ los valores de la relación de velocidades para los cuales existe siempre combustión son $m_2/m_1 \in [0.04, 1]$. Se observa como el rango ha aumentado de forma considerable al aumentar el parámetro d .

Por último, para concluir, comparando los resultados obtenidos en un solo canal con pérdidas a través de una de sus paredes con los obtenidos en un canal con recirculación del calor a través de una región delimitada de longitud $2L$ se observa cómo es posible extender la combustión para valores inferiores de la altura d que en un solo canal extinguían la llama por completo, gracias a que se obtienen temperaturas más altas que la temperatura adiabática, además de que existan valores de la longitud L a partir de los cuales hay un cierto rango $m_2/m_1 \in [m_{21,min}, m_{21,max}]$ donde siempre existe combustión. Este último hecho tiene especial importancia, y si para un canal sin recirculación de calor para un valor de $d = 5$ bastaban valores del coeficiente de transmisión de calor $b \approx 0.2$ como se puede comprobar en la Figura 10 para extinguir la llama por completo, con recirculación de calor se tiene que siempre existe combustión si $L > 1.1$ para $m_2/m_1 \in [0.4, 0.7]$.

Este hecho de poder encontrar siempre combustión para valores más pequeños de d tiene mucha relevancia, y denota que eligiendo de forma correcta ciertos parámetros geométricos y fluidos del problema se puede extender la combustión en unas escalas realmente pequeñas.

Capítulo 6

Conclusiones

6. Conclusiones

En este proyecto se ha estudiado el efecto que produce la recirculación de calor en la extinción de llamas pobres de premezcla en canales estrechos usando un modelo Swiss-roll bidimensional simplificado, mediante una resolución numérica. El estudio llevado a cabo muestra los rangos de relaciones de velocidades m_2/m_1 , en función de la relación de alturas h_2/h_1 y de distintas longitudes donde se permite la transmisión de calor en la pared superior L para los cuales es posible encontrar una llama estable en el canal. Para valores más allá de los máximos y mínimos de las relaciones de velocidades no es posible encontrar una llama estacionaria, y estaríamos en un caso donde en función de los distintos parámetros de que consta el problema la llama se estaría desplazando aguas arriba o aguas abajo.

Para comprobar la efectividad de la recirculación de calor, también se ha estudiado la extinción de la combustión en un solo canal estrecho sin recirculación, donde se permiten pérdidas de calor al exterior a través de una de sus paredes. Para este caso hemos podido comprobar el efecto que produce la reducción en la anchura del canal, y cómo éste es muy sensible a estos cambios, incrementándose mucho las pérdidas de calor a través de la pared incluso para valores bajos del coeficiente de transmisión de calor b , llegándose a casos críticos donde la llama no se puede sostener y se extingue. Es por esto que para poder contrarrestar las pérdidas de calor a través de la pared, se ha implementado un método para recircular el calor, donde un gas circula a contracorriente para precalentar la mezcla fría bajando de forma considerable las pérdidas de calor, resultando ser muy eficaz, ya que se extiende en gran medida el rango de anchuras del canal d donde la combustión estacionaria y estable es posible. Mientras que en un solo canal la temperatura máxima alcanzada es la temperatura adiabática $\theta_1 = 1$, y se ha podido observar que a partir de ciertos valores del coeficiente de transmisión de calor b la temperatura en la pared superior baja drásticamente al producirse una extinción local de la llama, la recirculación del calor permite alcanzar temperaturas bastante por encima de ésta, aumentando hasta valores del orden de $\theta_1 \sim 1.4$. Este aumento se hace más importante a medida que se disminuye la anchura del canal, ya que se convierte en la única manera de mantener la velocidad de reacción. La longitud L adquiere especial importancia en estos casos donde la anchura es muy pequeña, y cómo se muestra en el proyecto actúa también como valor limitante a la hora poder encontrar combustión dentro del canal, existiendo una longitud crítica L_c , por debajo de la cual la transferencia de calor no es suficiente para poder mantener la llama. Por otra parte, un aumento en la relación de velocidades m_2/m_1 lleva a una disminución en la temperatura, puesto que la recirculación de calor es menos efectiva, hasta alcanzar el valor $m_{21,max}$ a partir de la cual se produce la extinción de la llama, mientras que en el caso de una disminución en m_2/m_1 , la extensión de la llama se hace muy grande al aumentar la velocidad en el canal 1, doblándose la llama de forma muy pronunciada en el centro del canal, que es donde la velocidad es máxima, llevando la combustión a extinguirse debido al soplado de la llama para valores inferiores a $m_{21,min}$.

Por último se ha comprobado la eficacia de la recirculación del calor de los productos a la mezcla entrante en comparación con el caso donde sólo se tenía un canal con pérdidas a través de una de sus paredes. La mejora es evidente, ya que aparte de lograr alcanzar temperaturas bastante superiores a la temperatura adiabática (en un solo canal la

temperatura máxima alcanzada era precisamente la temperatura adiabática $\theta_1 = 1$) se ha encontrado que a partir de una cierta longitud L existe un rango $m_2/m_1 \in [m_{21,min} m_{21,max}]$ donde alturas infinitamente pequeñas del canal 1 h_1 en comparación con la altura del canal 2 h_2 ($h_2/h_1 \rightarrow \infty$) no son capaces de extinguir la combustión, incluso para valores bajos de d . En el capítulo 3 se mencionaba que en un canal sin recirculación, se necesitaba una anchura del canal $d \approx 12.5$ para poder encontrar siempre combustión sin importar las pérdidas de calor a través de las paredes. En cambio se ha demostrado que precalentando los gases en la entrada, es posible para un valor de $d = 5$ y una longitud L no muy alta, encontrar combustión, incluso en un caso extremo en el que la altura del canal 1 fuera infinitamente pequeña en comparación con la del canal 2.

El hecho de poder encontrar combustión siempre sin importar la relación de alturas de los canales para valores bajos de d remarca la eficacia de la recirculación de la entalpía de los gases de escape, y demuestra que seleccionando de forma correcta los parámetros geométricos y fluidos del problema es posible extender la existencia de la combustión en gran medida en comparación con el caso en que no se realizaba la recirculación de calor.

Apéndice A

Transformación de las ecuaciones

Introducción

Se puede observar en los resultados obtenidos previamente que los mayores gradientes tanto de temperaturas como de fracción másica se encuentran en una parte bastante reducida del dominio en comparación con los límites del mismo en la dirección axial. Esto es debido a que hasta que el fluido frío no entra en contacto con la zona donde se permite el intercambio de calor su temperatura no experimenta apenas cambios, al no haber transferencia de calor. Desde el punto de vista de la eficiencia a la hora de resolver los sistemas de ecuaciones, esto nos indica que se están haciendo cálculos innecesarios que consumen muchos recursos, lo cual, de evitarse produciría un ahorro tanto en el coste computacional como en el tiempo empleado en la resolución. El problema surge cuando no es posible acotar el dominio en la entrada de un fluido frío sin acotarlo a la vez a la salida del otro fluido, en este caso caliente, y que sí es de interés. Esto se debe a que no tienen ejes axiales de referencia independientes, sino que comparten la misma referencia.

La principal consecuencia de esta incapacidad de acotar el dominio en este caso, en el que se ha hecho una discretización en una malla uniforme, es que si se quieren obtener unos resultados más precisos hay que aumentar de manera considerable el número de nodos en toda la malla computacional y con ello el tiempo de cálculo. Por esto, ya que en realidad solo interesa obtener más resolución en la llama e inmediaciones, lo cual es una zona bastante acotada dentro del dominio, se procede a un refinado de la malla solo en esta zona mediante una transformación de coordenadas. Existen varias transformaciones de coordenadas sencillas según el tipo de refinado que nos interese. En este caso como nos interesa obtener la mayor concentración de nodos cerca de la llama, se procederá a un refinado de la malla en un punto interior x_c .

Otra opción para refinar la malla sólo en una pequeña región consistiría en tener dos zonas con mallas uniformes, donde Δx en la zona de la llama sería inferior a Δx en el resto del dominio. El problema que surge de este tipo de transformación es que se pierde un orden de precisión al utilizar diferencias centradas. Esto se puede explicar tomando las aproximaciones por series de Taylor

$$\begin{aligned} \varphi_{i+1,j} &= \varphi_{i,j} + \Delta x_i \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} + \frac{(\Delta x_i)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_{i,j} + \frac{(\Delta x_i)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} \right|_{i,j} + O(\Delta x_i^4) \\ \varphi_{i-1,j} &= \varphi_{i,j} - \Delta x_{i-1} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} + \frac{(\Delta x_{i-1})^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_{i,j} - \frac{(\Delta x_{i-1})^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} \right|_{i,j} + O(\Delta x_{i-1}^4) \end{aligned} \quad (35)$$

Restándolas resulta

$$\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j} = (\Delta x_i - \Delta x_{i-1}) \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} + (\Delta x_i^2 - \Delta x_{i-1}^2) \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_{i,j} + O(\Delta x^3) \quad (36)$$

De donde se obtiene

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{(\Delta x_i - \Delta x_{i-1})} + O(\Delta x) \quad (37)$$

Confirmando que a pesar de tener diferencias centradas el orden de precisión es de Δx . Debido a este hecho se escoge refinar la malla mediante una transformación de coordenadas, donde la precisión no disminuye.

Refinado de la malla en torno a un punto interior x_c

La forma de realizar el refinado de la malla es mediante un cambio de variables que se aplicarán a las ecuaciones que gobiernan el problema [Ref. 4]. Con este cambio de variables se pasará a tener una malla computacional, y una malla física. La malla computacional, designada con gorro, seguirá siendo uniforme, mientras que la malla física se alterará teniendo una mayor concentración de nodos en torno al punto x_c , dejando de ser uniforme en el eje axial. El procedimiento es el siguiente: Primero se forman las siguientes derivadas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{y}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial \bar{x}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{y}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \end{aligned} \quad (38)$$

Donde

$$\frac{\partial \bar{y}}{\partial y} = 1 \quad \frac{\partial \bar{x}}{\partial y} = 0 \quad \frac{\partial \bar{y}}{\partial x} = 0$$

Como resultado las derivadas parciales se simplifican a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \\ \frac{\partial}{\partial x} &= \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \end{aligned} \quad (39)$$

Al existir derivadas de segundo orden en las ecuaciones que gobiernan el problema, mediante la regla de la cadena se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2}{\partial \bar{y}^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \left(\frac{\partial^2 \bar{x}}{\partial x^2} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{x}} + \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \end{aligned} \quad (40)$$

Ahora se procede a la transformación de coordenadas mediante el siguiente cambio de variables

$$\bar{x} = B + \frac{1}{\tau} \sinh^{-1} \left[\left(\frac{x}{x_c} - 1 \right) \sinh(\tau B) \right] \quad (41)$$

Donde

$$B = \frac{1}{2\tau} \ln \left[\frac{1 + (e^\tau - 1)(x_c/h)}{1 + (e^{-\tau} - 1)(x_c/h)} \right] \quad 0 < \tau < \infty \quad (42)$$

$h = x_{max} - x_{min}$ y τ es el parámetro que determina el estrechamiento, cuyos valores varían entre 0 (estrechamiento nulo) y altos valores los cuales producen un mayor refinamiento cerca del punto $x = x_c$.

Para continuar se calculan las métricas $\partial \bar{x} / \partial x$, $\partial^2 \bar{x} / \partial x^2$ y x , que son, respectivamente

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{x}}{\partial x} &= \frac{\sinh(\tau B)}{\tau x_c \sqrt{1 + [((x + x_{max})/x_c) - 1]^2 \sinh^2(\tau B)}} \\ \frac{\partial^2 \bar{x}}{\partial x^2} &= -\frac{\sinh(\tau B)}{\tau x_c^2} \cdot \frac{[(x + x_{max})/x_c - 1] \sinh^2(\tau B)}{[1 + ((x + x_{max})/x_c - 1)^2 \sinh^2(\tau B)]^{3/2}} \\ x &= x_c \left\{ 1 + \frac{\sinh[\tau(\bar{x} - B)]}{\sinh(\tau B)} \right\} + x_{min} \end{aligned} \quad (43)$$

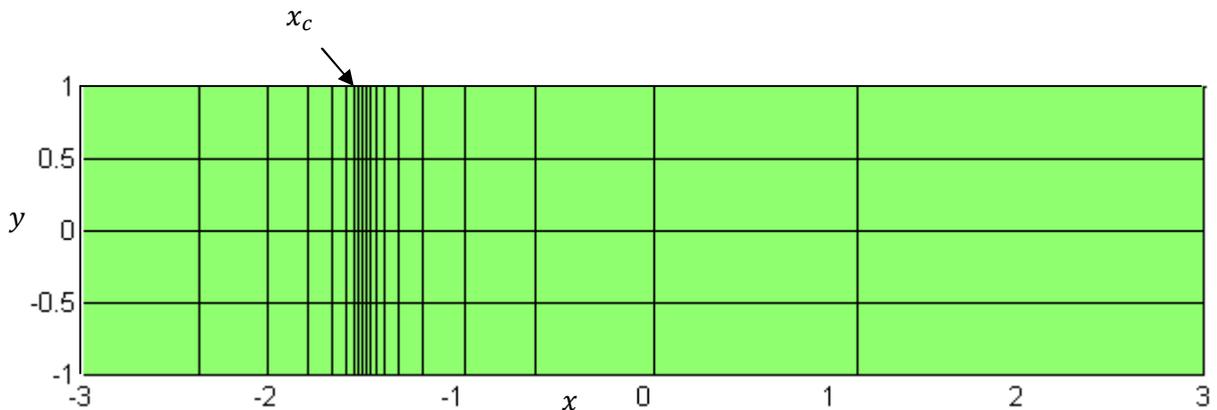


Figura 28: Malla física con estrechamiento en torno a $x_c = -1.5$, con $x \in (x_{min}, x_{max})$ $x_{max} = -x_{min} = 3$

En la Figura 28 se puede ver cómo queda la malla física con un estrechamiento en torno al punto $x_c = -1.5$ y un factor de estrechamiento de $\tau = 10.1$ mientras que en la Figura 29 vemos la malla computacional para el mismo número de puntos, que es uniforme.

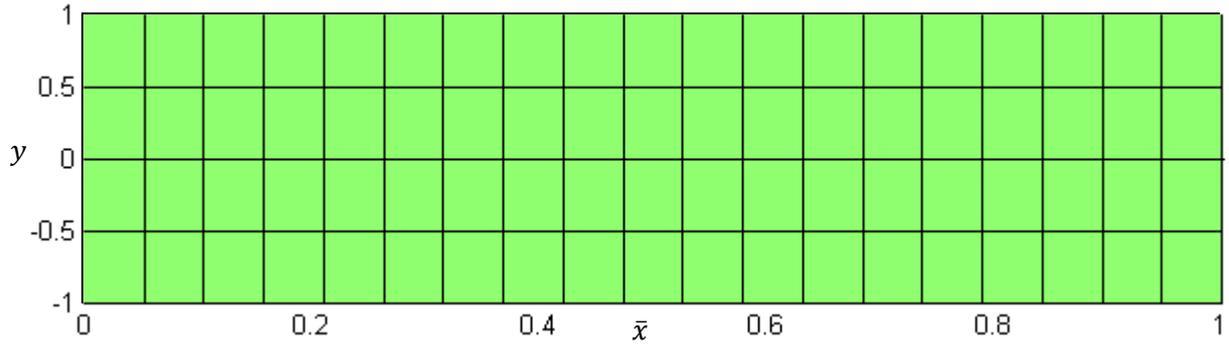


Figura 29: Malla computacional uniforme, donde la coordenada \bar{x} varía entre $\bar{x} \in (0, 1)$

Una vez se han calculado las métricas se procede al cambio de variables en las ecuaciones de conservación del problema, quedando

$$u_1(\bar{y}) \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right) \frac{\partial \theta_1}{\partial \bar{x}} - \frac{1}{Pe^2} \left(\left(\frac{\partial^2 \bar{x}}{\partial x^2} \right) \frac{\partial \theta_1}{\partial \bar{x}} + \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \bar{x}^2} \right) - \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \bar{y}^2} = d\omega_0 \quad (44)$$

$$u_1(\bar{y}) \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right) \frac{\partial Y_1}{\partial \bar{x}} - \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{Pe^2} \left[\left(\frac{\partial^2 \bar{x}}{\partial x^2} \right) \frac{\partial Y_1}{\partial \bar{x}} + \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_1}{\partial \bar{x}^2} \right] + \frac{\partial^2 Y_1}{\partial \bar{y}^2} \right) = -d\omega_0 \quad (45)$$

$$-u_2(\bar{y}) \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right) \frac{\partial \theta_2}{\partial \bar{x}} - \frac{1}{Pe^2} \frac{h_2}{h_1} \left[\left(\frac{\partial^2 \bar{x}}{\partial x^2} \right) \frac{\partial \theta_2}{\partial \bar{x}} + \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \bar{x}^2} \right] - \frac{1}{h_2/h_1} \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \bar{y}^2} = 0 \quad (46)$$

Con las siguientes condiciones de contorno

- En las paredes externas

$$\bar{y}_2 = \bar{y}_1 = -1 : \frac{\partial \theta_1}{\partial \bar{y}_1} = \frac{\partial \theta_2}{\partial \bar{y}_2} = \frac{\partial Y}{\partial \bar{y}_1} = 0 \quad (47)$$

- En la pared interna compartida

$$\bar{y}_2 = \bar{y}_1 = 1 : \begin{cases} \frac{\partial Y}{\partial \bar{y}_1} = 0 \\ -L < x < L : \frac{\partial \theta_1}{\partial \bar{y}_1} = -\frac{m_2}{m_1} \frac{\partial \theta_2}{\partial \bar{y}_2}, \quad \theta_1 = \theta_2 \\ x > L, x < -L : \frac{\partial \theta_1}{\partial \bar{y}_1} = \frac{\partial \theta_2}{\partial \bar{y}_2} = 0 \end{cases} \quad (48)$$

- En la entrada del fluido 1 y salida del fluido 2

$$x \rightarrow -\infty : \frac{\partial \theta_2}{\partial \bar{x}} = 0, \quad \theta_1 = 0, \quad Y = 1 \quad (49)$$

- En la salida del fluido 1 y entrada del fluido 2

$$x \rightarrow \infty : \quad \frac{\partial \theta_1}{\partial \bar{x}} = 0, \quad \theta_2 = 0, \quad \frac{\partial Y}{\partial \bar{x}} = 0 \quad (50)$$

Ahora que se tiene definido el problema completamente, con sus ecuaciones de conservación y sus correspondientes condiciones de contorno, el procedimiento para resolverlo es análogo al utilizado en las secciones anteriores. Únicamente hay que tener en cuenta que Δx ya no es constante en la malla física, por lo que para realizar las comprobaciones derivadas de integrar el flujo de forma axial y transversal (22), se tendrá que $\Delta x = x_{i+1} - x_i$.

Es interesante mencionar que esta transformación de coordenadas resulta muy práctica para resolver el problema para casos cuando la llama es extremadamente delgada, donde la utilización de una malla uniforme no es lo más adecuado, ya que en los casos donde la llama es muy fina generalmente existen gradientes muy grandes que requerirían de un refinamiento adicional para acometerlos, aumentando el número de nodos de forma considerable. En cambio, por medio de la transformación de coordenadas es posible alcanzar precisiones del orden de $\Delta x \sim 10^{-3}$ en la región de la llama con un número de nodos aceptable.

En el caso que se ilustra a continuación en la Figura 30, nos encontramos ante una llama muy delgada, con valores de $Pe = 50, d = 10, L = 1$. Para realizar el cálculo se ha discretizado usando la transformación de coordenadas utilizando un parámetro de estrechamiento $\tau = 8.1$ y se ha refinado en torno al punto $x_c = -0.7$.

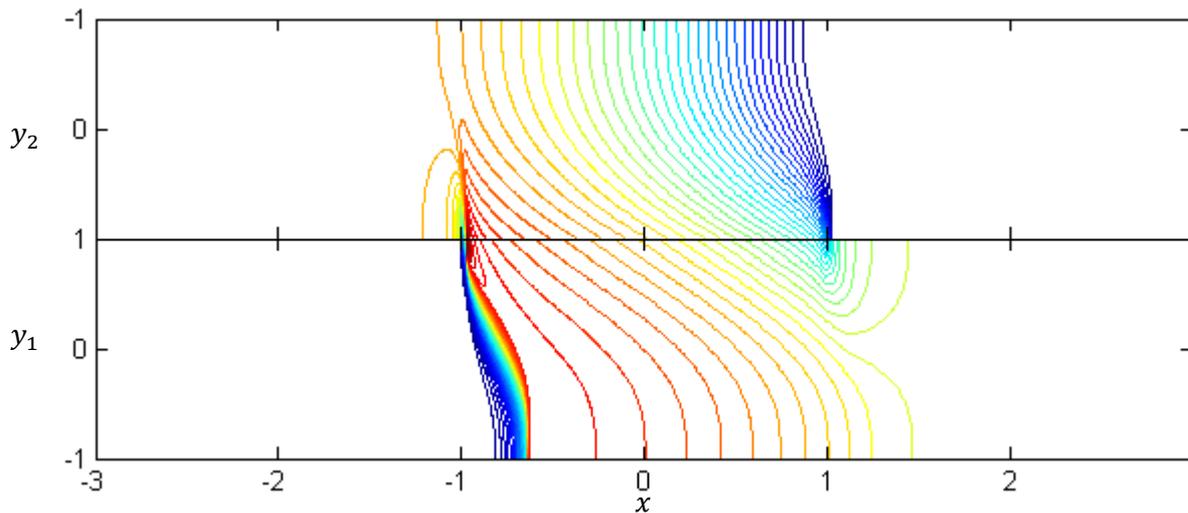


Figura 30: Isotermas para la temperatura en el canal 1 $\theta_1/\theta_{1,max} \in (0, 1)$ con $\Delta \theta_1/\theta_{1,max} = 0.025, \theta_{1,max} = 1.18$ y para la temperatura en el canal 2 $\theta_2/\theta_{2,max} \in (0, 1)$ con $\Delta \theta_2/\theta_{2,max} = 0.025, \theta_{2,max} = 1.16$. El valor de la longitud L donde se permite el intercambio de calor es $L = 1$, con un número de Damköhler $d = 10$ y $m_2/m_1 = 1, h_2/h_1 = 0.5, Pe = 50$. El cálculo ha sido realizado usando la transformación de coordenadas refinando en torno a $x_c = 0.8$ y con un factor de estrechamiento de $\tau = 8.1$.

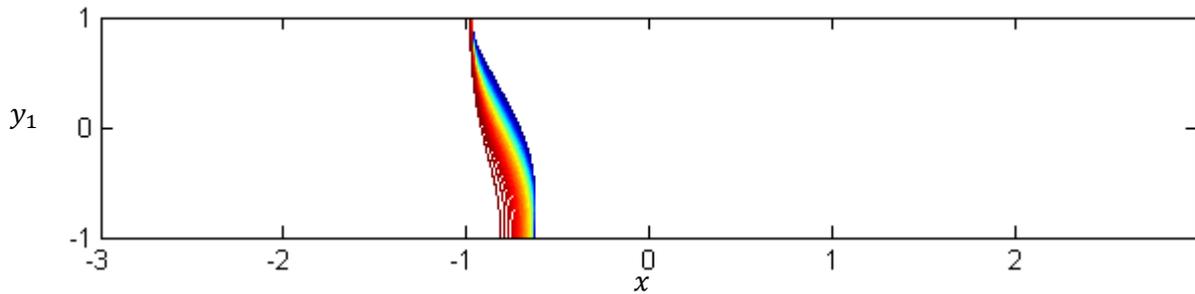


Figura 31: Isocontornos de la fracción másica $Y \in (0, 1)$ con $\Delta Y = 0.025$. Esta fracción másica es la correspondiente a la llama que se observa en la figura anterior para $Pe=50$. El valor de la longitud L donde se permite el intercambio de calor es $L = 1$, con un número de Damköhler $d = 10$ y $m_2/m_1 = 1, h_2/h_1 = 0.5, Pe = 50$. El cálculo ha sido realizado usando la transformación de coordenadas refinando en torno a $x_c = 0.8$ y con un factor de estrechamiento de $\tau = 8.1$.

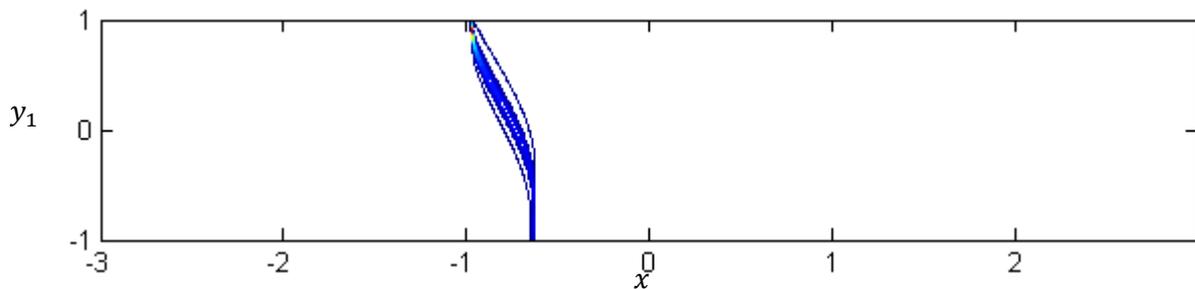


Figura 32: Isocontornos de la velocidad de reacción $\omega_0/\omega_{0,max} \in (0, 1)$ con $\Delta \omega_0/\omega_{0,max} = 0.025, \omega_{0,max} = 17.16$. Esta velocidad de reacción es la correspondiente a la llama que se observa en la figura anterior para $Pe=50$. El valor de la longitud L donde se permite el intercambio de calor es $L = 1$, con un número de Damköhler $d = 10$ y $m_2/m_1 = 1, h_2/h_1 = 0.5$. El cálculo ha sido realizado usando la transformación de coordenadas refinando en torno a $x_c = 0.8$ y con un factor de estrechamiento de $\tau = 8.1$.

Se puede comprobar en Figura 31 y Figura 32 cómo la velocidad de reacción y la fracción másica son extremadamente delgadas en las inmediaciones de la pared superior, requiriéndose una malla muy afinada en esta región. Con los parámetros que se han utilizado para la transformación de coordenadas resulta $\Delta x \approx 0.002$ en las inmediaciones de $x_c = -0.7$ utilizando $Nx = 401$ nodos en la dirección x , mientras que para obtener esta resolución en una malla uniforme se necesitarían $Nx \sim 3000$ nodos.

Apéndice B

Todos los cálculos llevados a cabo en este proyecto han sido realizados con el programa FORTRAN 77, que está disponible de forma gratuita en la red, y cuyo manual está también accesible en [Ref. 8]. Para llevar a cabo los distintos cálculos se ha hecho uso de la librería *slatec*, que es una compilación de las librerías *LAPACK* (Linear Algebra Package) y *BLAS* (Basic Linear Algebra Subprograms). Estas librerías se pueden encontrar de forma gratuita en [Ref. 7]. *LAPACK* está escrito en FORTRAN y proporciona rutinas para resolver sistemas de ecuaciones lineales simultáneos, soluciones por mínimos cuadrados de sistemas de ecuaciones lineales, problemas de autovalores, y problemas de valores singulares. También se proporcionan factorizaciones de matrices y estimación de números de condición. En todas las áreas se proporciona una funcionalidad similar para matrices reales y complejas, tanto para simple como doble precisión. *LAPACK* está escrito de tal manera que la mayoría del cálculo realizado se lleva a cabo por medio de llamadas a *BLAS*.

Prácticamente todo el tiempo de cálculo para resolver los sistemas de ecuaciones acoplados (1)-(2) y (11)-(12)-(13) se invierte en resolver los sistemas para cada incógnita (θ_1 , θ_2 o Y) en cada iteración. Para la resolución de cada sistema se ha recurrido al método de Gauss-Seidel por medio de la rutina *DSGS* contenida en la librería *slatec*. La principal ventaja de utilizar esta rutina es que sólo se trabaja con vectores, por lo que no es necesario almacenar las matrices enteras, sólo los valores no nulos, y puesto que las matrices utilizadas son muy *sparse* (gran densidad de ceros) se ahorra mucha memoria. La forma en que se almacenan estos valores no nulos consiste en un vector donde están todos los valores no nulos seguidos, sin importar el orden. Otro vector del mismo tamaño en el que se almacena la fila de cada uno de los valores no nulos, y otro vector de igual tamaño con las columnas de cada valor.

Se le tienen que proporcionar otros valores a la rutina para poder proceder a la resolución del sistema, como el número de iteraciones máximo (en este trabajo se ha utilizado un valor de $itemax = 1000$), el vector b , la matriz A , el vector de soluciones X (como input tendrá el valor de las condiciones iniciales), un criterio de convergencia, una tolerancia (se ha usado una tolerancia igual a $tol = 10^{-12}$) y algunos vectores adicionales utilizados únicamente como *workspace*.

Bibliografía

1. Carlos Fernández Pello, "Micropower generation using combustion: Issues and approaches". Proceedings of the combustion institute, Volume 29, 2002/pp. 883-899
2. M. Sánchez Sanz, "Premixed flame extinction in narrow channels with and without heat recirculation", Combustion and flame, 1, 2012
3. S.A. Lloyd & F.J. Weinberg. Nature 251 (1974) 47-49
4. Dale A. Anderson, John C. Tannehill, Richard H. Pletcher, "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", Third edition. (1984) 329-334
5. H.B. Keller, "Numerical methods in bifurcation problems" 1988
6. Immaculada Iglesias, "Apuntes de la asignatura: Simulación de flujos Industriales con Ordenador"
7. www.netlib.org
8. SunSoft, a Sun Microsystems, Inc. Business, "FORTRAN 77 4.0 Reference manual". http://www.sv.vt.edu/classes/ESM4714/exercises/RefManuals/SUN_F77_Manuals/F77_Ref.pdf