

Proyecto Fin de Carrera

MODELADO Y SIMULACIÓN DE QUEMADORES DE GAS CON DISTINTOS GRADOS DE PREMEZCLA

Autor

Benjamín Negro Cubel

Directora: María García Camprubí
Codirector: Norberto Fueyo Díaz

Escuela de Ingeniería y Arquitectura
Año 2014



**Escuela de
Ingeniería y Arquitectura**
Universidad Zaragoza



Departamento de Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos

PROYECTO FINAL DE CARRERA

MODELADO Y SIMULACIÓN DE QUEMADORES DE GAS CON DISTINTOS GRADOS DE PREMEZCLA

Proyecto realizado por Benjamín Negro Cubel

Director del proyecto:
María García Camprubí

Codirector del proyecto:
Norberto Fueyo Díaz

Agradecimientos

Quiero mostrar mis agradecimientos por la elaboración de este Proyecto Final de Carrera en primer lugar a la directora y codirector del mismo, la Dra. María García Camprubí y el Dr. Norberto Fueyo Díaz, por su ayuda y paciencia a lo largo de la elaboración del mismo. Quisiera agradecerles también la posibilidad que se me ha otorgado a la hora de colaborar en su grupo de investigación.

Así mismo quiero destacar la ayuda de las personas que integran dicho grupo de investigación, en especial a Carlos y Luis por poner sus conocimientos a mi disposición y Fernando por echarme una mano siempre que podía. También quiero dar las gracias al Departamento de Mecánica de Fluidos por permitirme realizar el proyecto final de carrera con ellos.

Me gustaría demostrar mi más sincero agradecimiento a mis amigos de dentro y fuera de la universidad por ayudarme a desestresarme y divertirme en los momentos más oportunos.

Además quisiera agradecer a mi familia, en especial a mi padre y a mi madre, por apoyarme siempre en mis decisiones y darme ánimos para no rendirme y seguir adelante.

Por último, pero no por ello menos importante, me gustaría agradecer a Elba todo su apoyo y comprensión durante este tiempo, persona sin la cual todo lo realizado hasta la fecha habría sido mucho más duro y costoso.

Resumen

MODELADO Y SIMULACIÓN DE QUEMADORES DE GAS CON DISTINTOS
GRADOS DE PREMEZCLA

La simulación de llamas mediante el modelado por ordenador es compleja debido, entre otras razones, al gran número de especies y reacciones involucradas en la combustión. Sin embargo, la simulación de llamas laminares tiene un gran interés, por ejemplo las empresas dedicadas a la fabricación de quemadores de cocina necesitan modelos computacionales que se asemejen a la realidad para poder diseñar sus quemadores. Para que estos modelos sean realistas tienen que predecir correctamente distintos aspectos de la llama como la temperatura o concentraciones de especies relevantes desde el punto de vista de la eficiencia y la seguridad (metano, dióxido de carbono, oxígeno, etc.).

Para asegurar la fiabilidad del modelo es conveniente validar las predicciones de llamas laminar simples, investigadas experimentalmente en un laboratorio, de las que se tengan medidas experimentales precisas y completas.

El objetivo principal de este proyecto es investigar la importancia de los distintos submodelos en la calidad de la predicción de una llama laminar medida en un laboratorio, como paso previo necesario para simular geometrías más complejas, como un quemador de gas de cocina doméstica.

Para conseguir este objetivo se seleccionará una geometría de un quemador de laboratorio de la se dispongan de datos experimentales, con la geometría seleccionada se simulará la combustión con el software ANSYS-FLUENT. En la simulación se probarán distintos modelos para representar la termoquímica de la combustión, como el mecanismo de Smooke o los Drm19 y Drm22. Además, la validación ha de ser correcta para distintos grados de premezcla de combustible y aire, desde llamas de difusión pura hasta llamas completamente premezcladas. Igualmente se estudiará el comportamiento de varios modelos difusivos, ya que la difusión es un proceso crucial en la combustión, especialmente en las llamas de difusión pura. Además se investigarán distintas formas de almacenar las tasas locales de reacción, como alternativa a la integración directa de las mismas, para disminuir el tiempo de simulación. Se estudiará también la influencia del tipo de malla, y en particular su tipología y densidad.

Por último también se realizarán simulaciones para observar como influye en la combustión la interacción entre la llama y una pared sólida (quenching). Para ello se usará una geometría de un quemador de laboratorio adecuado para este propósito. En esta simulación se usarán los conocimientos adquiridos con la llama laminar y así estudiar otros aspectos relativos a la geometría, como la inclinación de la llama o la distancia entre ésta y la pared.

Índice general

Índice de figuras	5
Índice de tablas	8
1. Introducción	9
1.1. Justificación del proyecto	9
1.2. ¿Cual es el objetivo de la CFD?	10
1.3. Planteamiento del problema	11
2. Modelado	13
2.1. Modelo matemático	13
2.1.1. Ecuaciones de transporte	13
2.1.2. Estimación de propiedades	14
2.1.3. Modelado de la radiación	15
2.1.4. Modelado de la difusión	15
2.1.5. Modelado de la cinética química	15
2.1.6. Mecanismos químicos	16
2.2. Llama aislada	17
2.2.1. Geometría	17
2.2.2. Condiciones de contorno	18
2.2.3. Mallado	19
2.3. Sistema llama-pared	19
2.3.1. Geometría	19
2.3.2. Condiciones de contorno	20
2.3.3. Mallado	21
3. Análisis de la llama aislada	22
3.1. Influencia de la malla	22
3.2. Influencia del modelo de difusión	24
3.3. Influencia del mecanismo químico	27
3.4. Influencia del método de resolución de la cinética química	30

4. Análisis del sistema llama-pared	32
4.1. Validación del sistema llama-pared	32
4.1.1. Llama a 90°	32
4.1.2. Llama de 60°	36
4.1.3. Llama de 30°	43
4.2. Comparación del CO producido	43
4.3. Influencia de la conductividad térmica	44
5. Conclusiones	45
A. Ecuaciones	47
A.1. Ecuaciones de transporte	47
A.2. Ecuaciones para la resolución de la cinética química	48
A.3. Discretización	48
A.4. Estimación de propiedades	49
A.5. Modelado de la radiación	51
A.6. Modelado de la difusión	52
B. Mallas utilizadas	53
C. Mecanismos utilizados	57
C.1. Mecanismo de Smooke	57
C.2. Mecanismo Drm19	59
C.3. Mecanismo Drm22	61
D. Gráficos llama laminar	64
D.1. Estudio de la influencia de la malla	64
D.2. Estudio del modelo difusivo	65
D.2.1. $\phi = 6,2$	65
D.2.2. $\phi = \infty$	66
D.2.3. $\phi = 2,5$	67
D.3. Influencia del método de resolución de la cinética química	68
D.3.1. $\phi = 6,2$	68
D.3.2. $\phi = \infty$	69
D.3.3. $\phi = 2,5$	70
D.4. Influencia del mecanismo utilizado	71
E. Gráficos sistema llama-pared	72
E.1. Llama 90°	73
E.1.1. H=12 mm	73
E.1.2. H=23 mm	74
E.1.3. H=38 mm	75
E.2. Llama 60°	76
E.2.1. H=12 mm	76

E.2.2. H=23 mm	78
E.2.3. H=38 mm	80
E.3. Llama 30°	82

Índice de figuras

1.1. Quemador doméstico	9
1.2. Esquema de llama aislada de laboratorio [1]	12
1.3. Esquema del sistema llama-pared [5]	12
2.1. Esquema de la llama aislada	17
2.2. Esquema del sistema llama-pared para $\theta = 90^\circ$ y $H = 23mm$	20
3.1. Evolución de la temperatura a lo largo del eje para distintas mallas	23
3.2. Perfiles de temperatura	25
3.3. Gráfico de la temperatura en el eje de la llama	26
3.4. Gráfico de la fracción molar de O_2 en el eje de la llama	26
3.5. Perfiles de la fracción másica de metano	28
3.6. Gráfico de la temperatura en el eje comparando los distintos mecanismos utilizados para $\phi = 6,2$	29
3.7. Temperatura en el eje comparando los distintos submodelos para la reso- lución de la cinética química	31
4.1. Contornos de isotermas en el plano r-z para un ángulo de 90° y $H=12$ mm. Contorno obtenido computacionalmente (izqa.). Contorno obtenido en el artículo de Hou y Ko [5] (dcha.)	33
4.2. Gráfico comparativo para una altura de 6 mm y $H=12$ mm	33
4.3. Contornos de isotermas en el plano r-z para un ángulo de 90° y $H=23$ mm. Contorno obtenido computacionalmente (izqa.). Contorno obtenido en el artículo de Hou y Ko [5] (dcha.)	34
4.4. Gráfico comparativo para una altura de 11 mm y $H=23$ mm	35
4.5. Contornos de isotermas en el plano r-z para un ángulo de 90° y $H=38$ mm. Contorno obtenido computacionalmente (izqa.). Contorno obtenido en el artículo de Hou y Ko [5] (dcha.)	35
4.6. Gráfico comparativo para una altura de 22 mm y $H=38$ mm	36
4.7. Perfil de temperaturas para $H=12$ cm y 60° de inclinación	37
4.8. Gráfico comparativo de $H=12$ mm y 60° para una altura (z) de 9 mm y una posición longitudinal (y) de 0 mm	38

4.9. Gráfico comparativo de $H=12$ mm y 60° para una altura (z) de 12 mm y una posición longitudinal (y) de 16 mm	38
4.10. Perfil de temperaturas para $H=23$ mm y 60° de inclinación	39
4.11. Gráfico comparativo de $H=23$ mm y 60° para una altura (z) de 20 mm y una posición longitudinal (y) de 2 mm	40
4.12. Gráfico comparativo de $H=23$ mm y 60° para una altura (z) de 23 mm y una posición longitudinal (y) de 2 mm	40
4.13. Perfil de temperaturas para $H=38$ mm y 60° de inclinación	41
4.14. Gráfico comparativo de $H=38$ mm para una altura (z) de 35 mm y una posición longitudinal (y) de 0 mm	42
4.15. Gráfico comparativo de $H=38$ mm y 60° para una altura (z) de 38 mm y una posición longitudinal (y) de 16 mm	42
4.16. Gráfico comparativo para la conductividad para una altura de 12 mm y 90°	44
B.1. Malla ortogonal estructurada	53
B.2. Malla utilizando la opción de refinamiento	53
B.3. Malla no estructurada de triángulos	54
B.4. Malla llama-pared 90°	54
B.5. Malla llama-pared 90° con zoom	55
B.6. Malla llama-pared 60°	55
B.7. Malla llama-pared 30°	56
D.1. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia de la malla	64
D.2. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del modelo difusivo para $\phi = 6,2$	65
D.3. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del modelo difusivo para $\phi = \infty$	66
D.4. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del modelo difusivo para $\phi = 2,5$	67
D.5. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del método de resolución de la cinética química para $\phi = 6,2$	68
D.6. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del método de resolución de la cinética química para $\phi = \infty$	69
D.7. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del método de resolución de la cinética química para $\phi = 2,5$	70
D.8. Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del mecanismo químico utilizado para $\phi = 6,2$	71
E.1. Gráficas comparativas para $H= 12$ mm y $\phi=90^\circ$ en función de la posición radial y la altura (z)	73
E.2. Gráficas comparativas para $H= 23$ mm y $\phi=90^\circ$ en función de la posición radial y la altura (z)	74
E.3. Gráficas comparativas para $H= 38$ mm y $\phi=90^\circ$ en función de la posición radial y la altura (z)	75

E.4. Gráficas comparativas para $H=12$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=12$ mm	76
E.5. Gráficas comparativas para $H=12$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=9$ mm	77
E.6. Gráficas comparativas para $H=23$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=23$ mm	78
E.7. Gráficas comparativas para $H=23$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=20$ mm	79
E.8. Gráficas comparativas para $H=38$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=38$ mm	80
E.9. Gráficas comparativas para $H=38$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=35$ mm	81
E.10. Perfil de temperatura para $H=12$ mm y 30°	82
E.11. Perfil de temperatura para $H=23$ mm y 30°	83
E.12. Perfil de temperatura para $H=38$ mm y 30°	84

Índice de tablas

2.1. Definición de la llama	18
2.2. Condiciones de entrada de la llama laminar	18
2.3. Valores de H y θ	20
2.4. Condiciones de entrada al sistema llama-pared.	20
3.1. Tiempos por iteración para cada malla	24
3.2. Tiempos por iteración para cada modelo de difusión	27
3.3. Tiempos por iteración para cada mecanismo químico	30
3.4. Tiempos por iteración para cada método de resolución de la cinética química	30
4.1. Tabla de la fracción molar máxima de CO	43
C.1. Mecanismo de Smooke para CH_4 (Unidades: cm, s, mol, cal,K).	58
C.2. Mecanismo Drm19 para CH_4 (Unidades: cm, s, mol, cal,K).	60
C.3. Mecanismo Drm22 para CH_4 (Unidades: cm, s, mol, cal,K).	63

Capítulo 1

Introducción

Un quemador es un dispositivo destinado a la producción de la llama poniendo en contacto las cantidades necesarias de aire y combustible para que se realice la combustión. Para un correcto diseño del quemador la llama debe ser estable, es decir, esta no debe desprenderse del quemador ni propagarse en su interior. Además la llama debe tener un poder de radiación suficiente según su función a realizar, así como unas dimensiones apropiadas.



Figura 1.1: Quemador doméstico

1.1. Justificación del proyecto

A la hora de diseñar un quemador como el de la figura 1.1 es necesario construir un modelo computacional, ya que la realización de éste tiene un menor coste económico que la construcción de un prototipo real, para ello se utiliza la mecánica de fluidos

computacional (CFD). Por otro lado, se tiene sobre un mayor control sobre los experimentos computacionales que sobre los experimentos reales. Además, con la información extraída de las simulaciones los procesos que ocurren en el funcionamiento del quemador se comprenden de forma más detallada.

A la hora de la realización del modelado de un quemador doméstico de gas convencional es necesario tener en cuenta: la entrada de aire primario y secundario, la mezcla de las distintas corrientes, la combustión y el transporte de la energía de la llama. Una vez realizado el modelo computacional del quemador se llevan a cabo simulaciones para obtener datos relativos al funcionamiento de este.

Estas simulaciones son muy costosas debido al tiempo requerido para realizarlas. De las distintas etapas es la combustión la fase que requiere más recursos computacionales. Para disminuir el coste computacional de esta etapa se van a analizar distintas formas de modelar la combustión. Los modelos analizados se validarán con datos experimentales.

El objetivo de disminuir el coste computacional es facilitar el proceso de modelado a las empresas encargadas de fabricar estos quemadores domésticos.

1.2. ¿Cual es el objetivo de la CFD?

La CFD resuelve de forma directa de la ecuación de Navier-Stokes o ecuación de conservación del momento (ecuación A.2) para un flujo con unas características determinadas y para una geometría concreta. Para ello se resuelven dichas ecuaciones en una serie de puntos de la geometría mediante métodos numéricos que transforman las ecuaciones diferenciales en ecuaciones algebraicas, este proceso se denomina discretización.

Por tanto, el primer paso que se da en la resolución de las ecuaciones es la selección de los puntos en los que se llevará a cabo la discretización, proceso que se denomina generación del mallado. Seleccionados los puntos, se unen mediante líneas dando lugar a lo que se denominan celdas. Éstas pueden tener forma de triángulos y cuadriláteros en el caso de dominios bidimensionales y de tetraedros, hexaedros, prismas y pirámides en el caso de dominios tridimensionales.

La CFD es necesaria porque es la herramienta perfecta para poder simular un gran número de casos en los que están involucrados los fluidos de forma rápida y económica. Con la CFD se simulan modelos que aún no se han construido, de este modo se observan las formas de mejorar el funcionamiento del modelo para que sea más eficiente.

La simulación de llamas laminar es muy extendida, en especial en las empresas fabricantes de quemadores de gas para cocina, ya que para diseñar un nuevo producto es necesario realizar modelos computacionales que se asemejen a la realidad.

Después de la realización del mallado se procede a la discretización de las ecuaciones. Como método de discretización se ha seleccionado el método de volúmenes finitos. Este método realiza una división del espacio físico en volúmenes de control para la resolución de estas ecuaciones en forma integral. Existen dos métodos para la creación de los volúmenes finitos:

- *Método del centro de la celda:* El punto en el cual se resuelven las ecuaciones es el

centro de la celda. El volumen de control coincide con la celda.

- *Método de los vértices de celda*: Los puntos en los que se resuelven las ecuaciones son los vértices de celda.

En este proyecto se utilizará el método del centro de la celda.

1.3. Planteamiento del problema

Los objetivos principales de este proyecto son:

- Investigar la importancia de distintos submodelos de predicción de una llama laminar como paso previo para simular geometrías más complejas.
- Observar cómo influye en la combustión la interacción entre una llama y una pared sólida (quenching).

Para alcanzar los objetivos del proyecto se van a utilizar dos configuraciones distintas, una llama aislada de laboratorio y un sistema llama-pared.

La llama aislada de laboratorio se ha obtenido del artículo Charles S. McEnally y Lisa D. Pfefferle [1] (figura 1.2). Se ha seleccionado esta geometría por sus propiedades: una configuración sencilla, disponer de datos experimentales con los que poder validar el modelo computacional y es laminar.

Por otro lado, se va a simular un sistema de llama-pared para estudiar la interacción entre la llama y la pared. A la hora de elegir se ha considerado adecuado tomar la llama del artículo de Shuhn-Shyurng Hou y Yung-Chang Ko [5] cuyo esquema se muestra en la figura 1.3. La pared en la que impacta la llama está refrigerada con agua.

La simulación de este sistema de llama-pared tiene especial relevancia para las empresas dedicadas a la fabricación de quemadores ya que en los quemadores reales está presente esta interacción.

Esta configuración de llama-pared proporciona un amplio abanico de casos disponibles al variar parámetros de la configuración: la distancia entre el tubo de combustible y la placa en la que impacta la llama (H) y el ángulo de dicho tubo con la horizontal (θ).

Para la realización de las simulaciones se utilizará el software comercial ANSYS-Fluent.

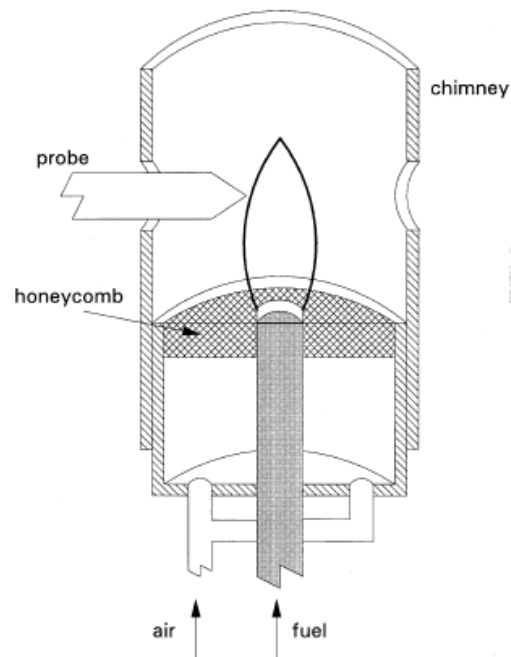


Figura 1.2: Esquema de llama aislada de laboratorio [1]

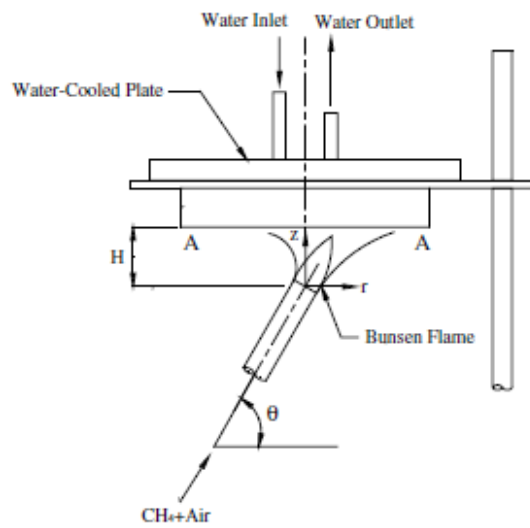


Figura 1.3: Esquema del sistema llama-pared [5]

Capítulo 2

Modelado

En este apartado se describe la metodología utilizada para el modelado de la llama aislada de laboratorio y el sistema llama-pared. Para su realización detalla el modelo matemático que se ha tenido en cuenta para la simulación, la geometría de las distintas llamas y las condiciones de contorno utilizadas.

2.1. Modelo matemático

Con objetivo de modelar matemáticamente la llama aislada y el sistema llama-pared es necesario resolver el flujo de aire y combustible necesario para obtener la llama. Para lo cual se utilizan las ecuaciones de transporte. Para resolver correctamente las ecuaciones de transporte se necesita estimar las propiedades de cada especie así como las propiedades del conjunto de especies. Tanto en la llama aislada como en el sistema llama-pared hay que utilizar modelos para la radiación, la difusión y la cinética química. Por último se realizará una revisión de los distintos mecanismos de combustión para el metano.

2.1.1. Ecuaciones de transporte

Las ecuaciones de transporte que se resuelven son:

- Ecuación de continuidad o conservación de materia (ecuación A.1).
- Ecuación de conservación del momento (ecuación A.2).
- Ecuación de la energía (ecuación A.3).
- Ecuación del transporte de especies químicas (ecuación A.4).

En lo relativo a la simulación de la reacción de combustión se utiliza el método finite-rate, que utiliza la expresión de Arrhenius. En el anexo A.2 se detalla el proceso que se lleva a cabo con este método.

Para discretizar estas ecuaciones Fluent utiliza una técnica basada en volúmenes de control. Esta técnica consiste en la integración de la ecuación de transporte sobre cada volumen de control o celda. En el Anexo A.3 se detallan los pasos a seguir para realizar la discretización de las ecuaciones de transporte.

2.1.2. Estimación de propiedades

Para la estimación de las propiedades se ha utilizado la teoría cinética de los gases. Esta teoría explica las características y propiedades de la materia y establece que el calor y el movimiento están relacionados, que las partículas de toda la materia están en movimiento hasta cierto punto y que el calor es una manifestación de este movimiento. Esta teoría establece cinco suposiciones:

1. Los gases están compuestos por moléculas. La distancia entre éstas es muy grande comparada con su tamaño y su volumen total es sólo una fracción del espacio total ocupado por el gas.
2. No existen fuerzas de atracción entre las moléculas de un gas.
3. Las moléculas de los gases se encuentran en un estado de movimiento rápido constante, chocando unas con otras y con las paredes del recipiente de forma aleatoria.
4. Todas las colisiones son perfectamente elásticas.
5. La energía cinética promedio por molécula de un gas es proporcional a la temperatura en Kelvin, y la energía cinética promedio por molécula de todos los gases es igual a la misma temperatura

Para bajas presiones y elevadas temperaturas se puede aplicar la teoría cinética. En nuestro caso, al tener estas condiciones, se han calculado las propiedades de los gases mediante esta teoría.

Las propiedades estimadas son:

- Para el cálculo de la viscosidad de cada compuesto se utilizará la ecuación A.14 y para la mezcla utilizaremos la ecuación A.15.
- En el caso de la conductividad térmica tenemos la ecuación A.16 para el cálculo de la conductividad de cada compuesto y la ecuación A.17 para el cálculo de la conductividad térmica de la mezcla de gases.
- En lo referente al coeficiente difusivo, se calcula mediante la ecuación de Chapman-Enskog modificada (ecuación A.20).
- Para calcular la capacidad calorífica de los elementos mayoritarios se utilizan polinomios en función de la temperatura (ecuación A.23), y para la capacidad calorífica de la mezcla utilizamos la ecuación A.21.
- En el caso de la densidad utilizamos la ley de los gases ideales, por lo que definimos la densidad como se muestra en la ecuación A.23.

2.1.3. Modelado de la radiación

La transmisión de calor por radiación es el intercambio de energía entre cuerpos (separados entre sí) por medio de ondas electromagnéticas. La radiación provoca una disminución en la temperatura de la llama y un aumento en la temperatura de las paredes.

Para resolver la radiación utilizamos el modelo de ordenadas discretas (DO, discrete ordinates). Este modelo resuelve la ecuación de transporte radiativo (RTE, ecuación A.24) para un número finito de ángulos sólidos discretos, cada uno asociado con un vector de dirección \vec{s} fijado en el sistema cartesiano (x, y, z) .

El modelo de ordenadas discretas considera la RTE en la dirección \vec{s} como una ecuación de campo, por lo que la ecuación A.24 queda escrita como se observa en la ecuación A.25

2.1.4. Modelado de la difusión

La difusión es el transporte de uno o más componentes de una mezcla fluida bajo el efecto de un gradiente hasta eliminar o neutralizar dicho gradiente. Este gradiente puede ser de concentración, de presión, de potencial químico, etc.

Para el cálculo del flujo difusivo se han utilizado dos modelos distintos, el primero de ellos es la difusión según la Ley de Fick (Fickian Diffusion) y el otro es la obtención de la difusión a partir de las ecuaciones de Stefan-Maxwell (Full Multicomponent Diffusion o difusión multicomponente).

Ley de Fick. En la ecuación A.26, \vec{J}_i es el flujo difusivo de la especie i debido a los gradientes de concentración y temperatura. Esta ecuación es válida cuando la composición de la mezcla no cambia o cuando $D_{i,m}$ (coeficiente de difusión de la especie i en la mezcla) es independiente de la composición. Esta aproximación es aceptable cuando $Y_i \ll 1$ (fracción másica) para todos los compuestos a excepción del gas portador.

Difusión multicomponente. En este modelo difusivo el flujo difusivo se obtiene resolviendo la ecuación de Stefan-Maxwell (ecuación A.27). Este método requiere la computación de N^2 determinantes de adjuntos de tamaño $(N - 1) \times (N - 1)$ y un determinante de tamaño $N \times N$, siendo N el número de especies químicas.

Los resultados obtenidos mediante cada uno de los métodos se comparan con los datos experimentales en el Apartado 3.2.

2.1.5. Modelado de la cinética química

Para calcular la cinética química se utiliza la integración directa, este proceso es muy costoso computacionalmente por lo que se dispone de dos métodos para reducir el tiempo empleado en este cálculo.

Para simulaciones en estado estacionario y utilizando un método de resolución basado en la presión, se puede utilizar el Stiff Chemistry Solver. Este Solver aproxima la tasa

de reacción R_i en la ecuación del transporte de especies (ecuación A.4) como se muestra en la ecuación A.9. Por defecto el valor de τ (paso temporal) está fijado en la décima parte de la mínima escala temporal convectiva o difusiva en la celda. De esta forma podemos acelerar el cálculo de la cinética química al utilizar la integración directa. El Stiff Chemistry Solver proporciona la posibilidad de utilizar ISAT.

ISAT o In-Situ Adaptive Tabulation se utiliza para mecanismos cinéticos que son deterministas, es decir, el estado reaccionado final es una función única del estado inicial sin reaccionar y el paso del tiempo. En teoría esta operación se realizaría una vez y sería tabulado. La tabla puede ser interpolada con métodos que aceleren el tiempo de ejecución siempre y cuando la interpolación sea más eficiente que la integración química. ISAT es un método para tabular las regiones del espacio con un control del error. Al principio de la simulación la tabla está vacía, por lo que durante las primeras iteraciones se resuelve mediante integración directa y se van almacenando. Con este método las primeras iteraciones se vuelven un poco más lentas, pero con el tiempo, la tabla se va llenando y acelerando el tiempo de cálculo.

2.1.6. Mecanismos químicos

Se denomina mecanismo de reacción a la secuencia de reacciones elementales que, a través de intermedios, conducen a una reacción global determinada. Esta reacción es la combustión de metano. Para que ésta se lleve a cabo son necesarias 325 reacciones y 53 especies. El software utilizado tiene un límite de 50 especies por lo que se tiene que utilizar un mecanismo reducido. Se han escogido cuatro mecanismos realizados por la Universidad de California, Berkeley [12].

Los mecanismos reducidos elegidos son:

Smooke. Este mecanismo consta de 16 especies y 46 reacciones.

Drm19. En este caso tenemos 19 especies y 84 reacciones.

Drm22. En este mecanismo intervienen 22 especies y 104 reacciones.

GriMech211. Para este caso hay 49 especies y 277 reacciones.

Se han elegido estos conjuntos de reacciones debido a la diferencia del número especies y reacciones entre ellos. Teniendo mecanismos muy reducidos como el de Smooke y otros próximos a las 53 especies como el GriMech211. De esta forma se compararán los datos obtenidos computacionalmente con los datos experimentales (Apartado 3.3) para así estudiar las ventajas e inconvenientes de cada uno de los mecanismos.

En el Anexo C están tabulados los mecanismos de Smooke, Drm19 y Drm22. Por su elevada extensión se ha omitido el GriMech211.

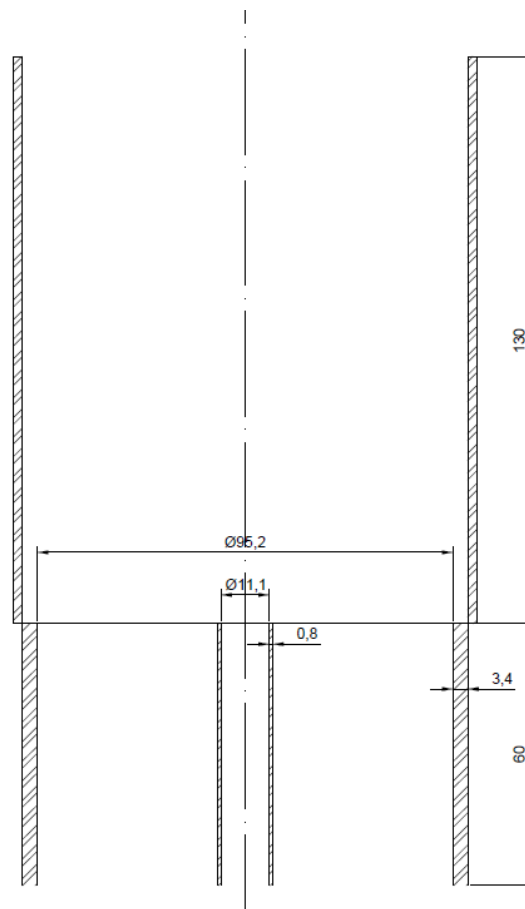


Figura 2.1: Esquema de la llama aislada

2.2. Llama aislada

2.2.1. Geometría

La geometría de la llama aislada se ha obtenido del artículo de McEnally C. y Pfefferle L. [1]. En la figura 2.1 se muestra un esquema de la geometría de esta llama. En esta figura se observan los conductos de entrada primario y secundario así como una chimenea donde se produce la combustión. Por el conducto primario se introduce el aire primario y el combustible con diferentes grados de premezcla, mientras que por el conducto secundario entra aire.

En la figura 1.2 se aprecia la existencia de un honeycomb o panel de abejas al final del conducto secundario. La función de este honeycomb es favorecer la formación de un flujo uniforme y homogéneo. En la bibliografía [1] no se especifican las dimensiones del honeycomb, por lo que no se simulará.

Los conductos de entrada primario y secundario y la chimenea están fabricados de

latón. En la bibliografía no se detalla el tipo de latón utilizado por lo que se eligió latón C260 para la estimación de propiedades.

2.2.2. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno son aquellas condiciones que definen el comportamiento del modelo en la frontera. Para esta llama aislada se han definido condiciones de contorno de entrada y salida del sistema y condiciones de contorno en las paredes del quemador.

En la figura 2.1 se observa que la llama aislada tiene simetría axial. Este hecho hace que se pueda realizar la simulación en axisimétrico. Con esta condición de contorno se ha realizado la simulación en 2D. Al realizar la simulación en axisimétrico hay que definir el eje del quemador con la condición de simetría.

Para describir los flujos másicos y composiciones de entrada se define el ratio de equivalencia (ϕ). El ratio de equivalencia es la fracción de flujo de aire primario necesario para una combustión completa y el flujo realmente utilizado. Teniendo en cuenta que el aire primario utilizado es sintético con una concentración en oxígeno del 25.5 % el ratio de equivalencia se define como $\phi = 7,84 \frac{Q_{CH_4}}{Q_{pa}}$. Los datos de entrada que se muestran en la tabla 2.1 se han obtenido del artículo de McEnally C. y Pfefferle L. [1].

ϕ	Q_{CH_4} ($cm^3 STP/min$)	Q_{pa} ($cm^3 STP/min$)	Q_{sa} ($cm^3 STP/min$)	Q_{Ar} ($cm^3 STP/min$)	Re	Y_{CH_4}
∞	330	0	44,000	3.3	38	0.99
6.2	330	420	44,000	7.6	86	0.41
2.5	330	1,050	44,000	14.0	158	0.24

Tabla 2.1: Definición de la llama

El número de Re esta calculado con el caudal completo de fuel a 300K. La fracción molar de metano está calculada para el combustible sin reaccionar. Q_{pa} es el flujo de aire primario, Q_{sa} es el flujo de aire secundario, Q_{CH_4} es el flujo de entrada de metano y Q_{Ar} es el flujo de Argón.

El software utilizado para la simulación no admite condiciones de entrada en caudales volumétricos por lo que se transformaron a caudales másicos considerando la ley de los gases ideales. En la tabla 2.2 se muestran los datos introducidos al programa de simulación.

ϕ	$Q_{CH_4+pa}(Kg/s)$	$Q_{sa}(Kg/s)$	Y_{CH_4}	Y_{Ar}	Y_{O_2}
∞	$3.698 \cdot 10^{-6}$	$8.686 \cdot 10^{-4}$	0.9757	0.0243	0.0000
6.2	$1.213 \cdot 10^{-5}$	$8.686 \cdot 10^{-4}$	0.2976	0.0171	0.1926
2.5	$2.477 \cdot 10^{-5}$	$8.686 \cdot 10^{-4}$	0.1457	0.0154	0.2358

Tabla 2.2: Condiciones de entrada de la llama laminar

Al no simular el panal de abejas es necesario imponer unas condiciones de contorno que lo modelen, por ello se ha puesto como condición de contorno un perfil de velocidad plano a la entrada del aire secundario. Para el conducto de aire primario también se pone la condición de perfil de velocidad plano a la entrada, sin embargo al realizar la simulación de todo el conducto se tiene un perfil de velocidad parabólico a la salida de éste.

En la salida del sistema se ha establecido la condición de contorno de presión atmosférica.

El combustible y el aire primario son calentados por la llama debido a la radiación y a la convección. Para que los gases de entrada no se calienten en exceso se ha puesto como condición de contorno la convección de calor entre ambos conductos. De esta forma se consigue enfriar la corriente primaria con la corriente secundaria.

2.2.3. Mallado

Se denomina malla al conjunto de elementos discretos o celdas en las que se resuelven las ecuaciones diferenciales. Para la configuración de la llama aislada se van a utilizar dos mallas:

- Malla estructurada, ortogonal y cartesiana (figura B.1).
- Malla no estructurada realizada con triángulos (figura B.3).

Para el caso de la malla estructurada se utilizará una herramienta de refinamiento automático de Fluent. Esta herramienta refina la malla en función del gradiente de temperatura de tal forma que, para elevados gradientes de temperatura la malla se refina aumentando el número de celdas, mientras que para gradientes de temperatura pequeños o cuando no existe gradiente las celdas se vuelven más vastas, reduciendo su número. La malla correspondiente a utilizar esta herramienta se muestra en la figura B.2.

2.3. Sistema llama-pared

2.3.1. Geometría

La geometría del sistema llama-pared se ha obtenido del artículo de Hou y Ko [5]. En la figura 2.2 se observa un esquema de este sistema. En este esquema se tiene un conducto de entrada de una mezcla de aire y combustible, además consta de un plato refrigerado por agua contra el que impactará la llama.

Los valores que toman las variables H y θ se observan en la tabla 2.3.

Al tener tres valores para el ángulo del conducto y tres valores para la distancia entre la salida del conducto y la pared de impacto de la llama se tendrán nueve geometrías distintas.

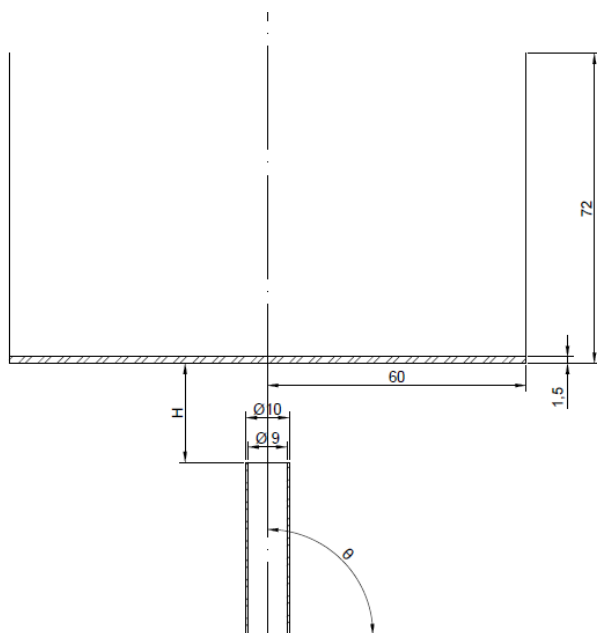


Figura 2.2: Esquema del sistema llama-pared para $\theta = 90^\circ$ y $H = 23\text{mm}$

$H(m)$	0.012	0.023	0.038
θ	90°	60°	30°

Tabla 2.3: Valores de H y θ

2.3.2. Condiciones de contorno

Para este sistema llama-pared serán necesarias condiciones de contorno para las entradas y salidas de flujo así como para las distintas paredes del sistema. Estas condiciones de contorno no varían entre las nueve geometrías.

Las condiciones de contorno de temperatura y fracción másica para la entrada de flujo se pueden observar en la tabla 2.4.

Gasto másico (kg/s)	$T(K)$	X_{O_2}	X_{CH_4}
$1,415 \cdot 10^{-5}$	400	0,2097	0,1000

Tabla 2.4: Condiciones de entrada al sistema llama-pared.

Las condiciones de contorno de la placa en la que impacta la llama se han diseñado para imitar el fenómeno de convección que tiene lugar en esta pared. El coeficiente de transferencia de calor se ha fijado en $200\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ y la temperatura de la corriente libre, el agua que refrigera la pared, en 300K . El material de esta pared es acero.

De igual forma que las paredes del conducto de entrada en la llama aislada tenemos las paredes correspondientes a la entrada de combustible y aire primario. En este caso el material es aluminio y también se ha puesto la condición de contorno de convección de calor entre el conducto y la corriente libre. Como en el artículo de Hou y Ko [5] no se menciona la longitud del tubo de entrada, sólo se simuló una parte del conducto para que el flujo estuviera desarrollado.

El aire tomado de fuera del sistema para ser utilizado como aire secundario se ha supuesto en condiciones atmosféricas, es decir, 300 K y 1 atm con un 21 % de oxígeno.

2.3.3. Mallado

Al tener nueve geometrías distintas se van a utilizar nueve mallas distintas. Para los casos del sistema con un ángulo recto se va a simular en axisimétrico al existir simetría axial. Esto hace que las simulaciones se realicen en 2D. Las mallas utilizadas en estos casos se observan en las figuras B.4 y B.5.

En el resto de los casos ya no existe simetría axial por lo que es necesario realizar las simulaciones en 3D. Esto provoca que el número de celdas aumente y se tengan unos tiempos de cálculo mayores. Las mallas para estos casos se observan en las figuras B.6 y B.7.

Capítulo 3

Análisis de la llama aislada

En este apartado se presentan los resultados obtenidos en el estudio de la llama aislada y su comparación con los datos experimentales obtenidos del artículo de McEnally y Pfefferle [1].

El objetivo de este apartado es determinar la influencia de distintos modelos computacionales. Los aspectos a estudiar son: la malla, donde se probarán mallas estructuradas y no estructuradas; el modelo de difusión, se estudiarán formas de modelar el flujo difusivo como la Ley de Fick o las ecuaciones de Stefan-Maxwell; el mecanismo químico, se analizarán mecanismos químicos como el mecanismo de Smooke, Drm12, Drm22 y GriMech; y el método de resolución de la cinética química, dónde, se estudiarán formas de simular y almacenar la cinética de reacción como la integración directa y los métodos de tabulación.

3.1. Influencia de la malla

Para estudiar la influencia de la malla se han utilizado dos mallas distintas, una malla ortogonal estructurada y una malla no estructurada de celdas triangulares. A su vez, a cada una de las mallas se le ha aplicado el refinamiento por el método del gradiente explicado en el Apartado 2.1. Las mallas utilizadas se pueden observar en el Anexo B. En las simulaciones realizadas se han mantenido constantes todos los parámetros a excepción del tipo de malla utilizada. El ratio de equivalencia de entrada de los gases de combustión ha sido $\phi = 6,2$.

En la figura 3.1 se observa la variación de la temperatura a lo largo de eje la llama (z). Fijándonos en los datos experimentales observamos que a 1 cm de la salida del conducto de entrada la temperatura aumenta con una pendiente constante hasta los 2.5 cm aproximadamente. En este punto hay un cambio en la pendiente que se mantiene hasta alcanzar la temperatura máxima y descender posteriormente. Los datos obtenidos computacionalmente captan estos tres cambios en la pendiente y la posición de la temperatura máxima. Entre las distintas mallas utilizadas no se observa una diferencia significativa.

Se han realizado comparaciones para la fracción molar de metano (figura D.1a),

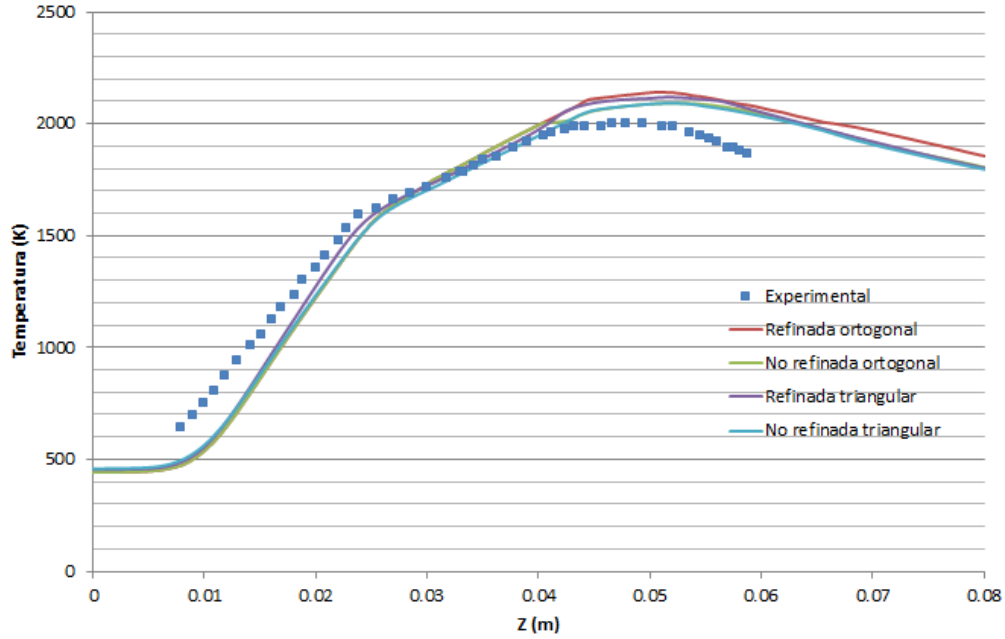


Figura 3.1: Evolución de la temperatura a lo largo del eje para distintas mallas

oxígeno (figura D.1b) y dióxido de carbono (figura D.1c). En estas figuras se confirma lo observado en la figura 3.1, todas las mallas tienen un comportamiento similar.

Como las mallas utilizadas tienen un comportamiento análogo a los datos experimentales vamos a considerar tres aspectos para designar un tipo de malla que sea utilizado en las simulaciones posteriores:

- Tiempo necesario para crear la malla.
- Costes computacionales.
- El efecto de la difusión numérica.

Para geometrías complejas o rangos de longitudes de escala del flujo grandes, un mallado no estructurado suele ser más apropiado, requiriendo un menor número de celdas que un mallado estructurado. Esto es debido a que las mallas no estructuradas permiten que las celdas sean agrupadas en regiones seccionadas del dominio, mientras que las mallas estructuradas pueden llegar a requerir un gran número de celdas en zonas donde no se necesitan. Para geometrías de un grado de complejidad medio, las mallas estructuradas ofrecen muchas de las ventajas de las mallas no estructuradas.

Por otro lado, las mallas estructuradas permiten mayores relaciones de aspecto (relación entre el lado más largo y el más corto de la celda). Una relación de aspecto elevada en mallas no estructuradas implica mayores esquinamientos de las celdas, lo que repercute negativamente en la convergencia del problema y por tanto en los costes computacionales.

Todos los algoritmos numéricos presentan el problema de la difusión numérica debido a los errores de truncamiento derivados de la discretización de las ecuaciones utilizadas. La difusión numérica está muy relacionada con la resolución de la malla, así mallas refinadas proporcionarán menor difusión numérica. También se minimiza el problema cuando el flujo está alineado con la malla, lo que hace más apropiadas las mallas estructuradas.

Se han tomado medidas del tiempo por iteración para cada una de las mallas. Los datos obtenidos se recogen en la tabla 3.1. En la tabla se aprecia que el tiempo de cálculo por iteración es menor cuanto menos celdas tiene la malla.

	Malla ortogonal	Malla ortogonal refinada	Malla de celdas triangulares	Malla de celdas triangulares refinada
Tiempo por iteración (s/it)	2.7	9.5	5.7	17.5
Número de celdas	17,314	89,648	44,168	157,976

Tabla 3.1: Tiempos por iteración para cada malla

Por estos motivos se ha asignado la malla estructurada para las simulaciones posteriores. Como no hay variación en los resultados utilizando la herramienta de refinado y se obtienen tiempos de cálculo mayores no se utilizará en las simulaciones posteriores.

3.2. Influencia del modelo de difusión

En el Apartado 2.1 se han descrito los modelos de difusión que se han utilizado en las simulaciones: la difusión según la aproximación de la Ley de Fick y la difusión mediante la resolución de las ecuaciones de Stefan-Maxwell o difusión multicomponente. En las simulaciones realizadas se han mantenido constantes todos los parámetros a excepción del modelo de difusión y el ratio de equivalencia. Se han realizado simulaciones para $\phi = 2,5$ (llama premezclada), $\phi = 6,2$ (llama parcialmente premezclada) y $\phi = \infty$ (llama de difusión).

Para una alimentación parcialmente premezclada se tienen las figuras 3.2a y 3.2b. En la primera se observa la temperatura en el dominio utilizando la aproximación de la Ley de Fick. La segunda muestra la temperatura utilizando el modelo de difusión multicomponente. En la figura correspondiente a utilizar la Ley de Fick (3.2a) se observa que la llama se encuentra despegada del conducto de entrada, mientras que en la imagen del modelo de difusión multicomponente (3.2b) la llama se encuentra anclada al conducto de entrada de los gases de combustión.

Al comparar los datos obtenidos en las simulaciones con los datos experimentales se obtienen las figuras 3.3 y 3.4. En la primera se observa la evolución de la temperatura en el eje de la llama y en la segunda la variación de la fracción molar de oxígeno en el eje. En ambas figuras los datos computacionales obtenidos para la Ley de Fick no se ajustan. Por el contrario los datos para el modelo de difusión multicomponente están próximos a los datos experimentales.

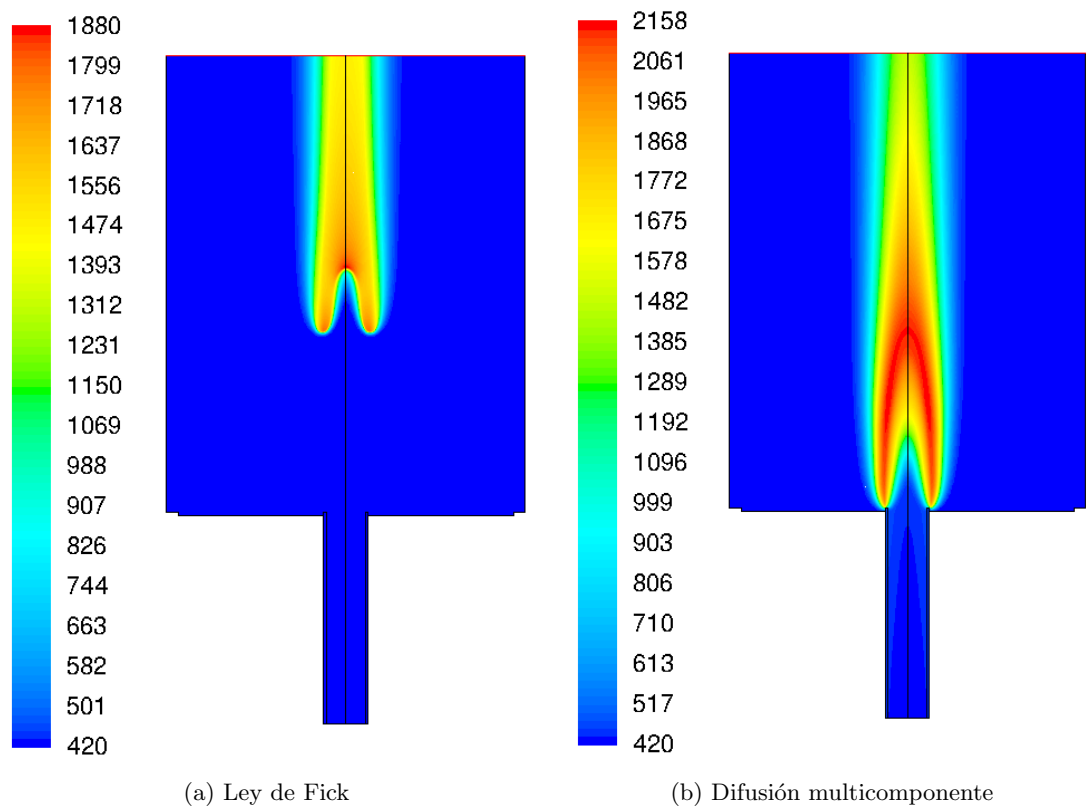


Figura 3.2: Perfiles de temperatura

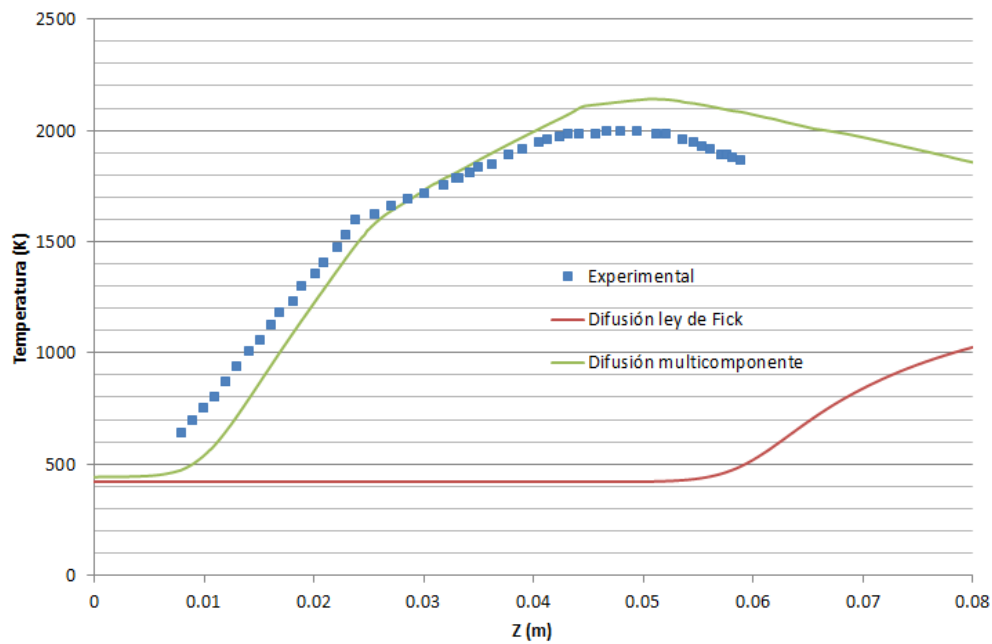
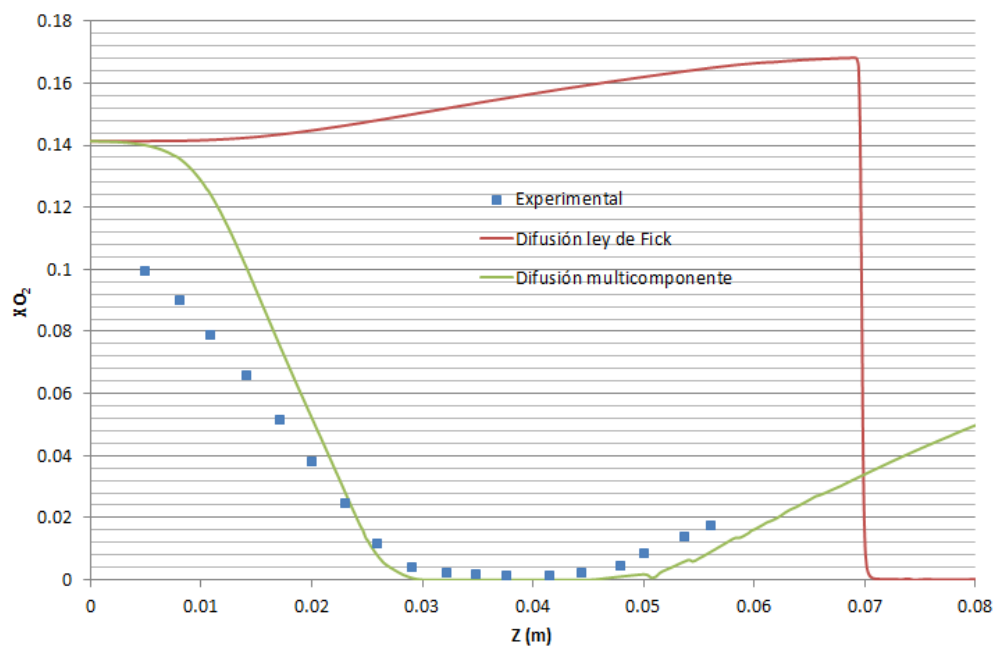


Figura 3.3: Gráfico de la temperatura en el eje de la llama

Figura 3.4: Gráfico de la fracción molar de O_2 en el eje de la llama

Las figuras para los casos de llama premezclada y llama de difusión correspondientes a la temperatura, fracción molar de metano, oxígeno y dióxido de carbono se encuentran en el Anexo D.2.

En todos los casos se observa que la difusión según la Ley de Fick es un modelo inapropiado para este tipo de simulaciones, ya que dicha ley es sólo aplicable cuando la fracción molar de los gases a excepción del gas portador es mucho menor que la unidad ($Y_i \ll 1$). Debido a que la difusión multicomponente ofrece unos resultados realistas se utilizará el para posteriores simulaciones.

Para entender mejor el funcionamiento de ambos modelos difusivos se realizaron simulaciones sin tener en cuenta la combustión. En la figura 3.5 se observa que en el caso de no tener en cuenta la combustión los perfiles de fracción másica de metano son similares en ambos métodos. Con estas simulaciones se demuestra que la ley de Fick no es aplicable con combustión pero sí para simular la difusión en un flujo multicomponente.

En lo referente a los tiempos de cálculo para cada modelo de difusión, en la tabla 3.2 se pueden observar los tiempos por iteración. El tiempo por iteración para la utilización de la Ley de Fick es inferior al tiempo por iteración para la difusión multicomponente, pero como se ha explicado anteriormente es necesaria la resolución de las ecuaciones de Stefan-Maxwell para simular la llama correctamente.

	Ley de Fick	Difusión multicomponente
Tiempo por iteración (s/it)	1.3	2.7

Tabla 3.2: Tiempos por iteración para cada modelo de difusión

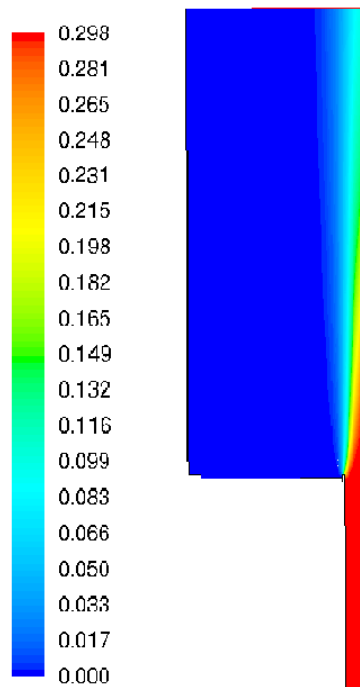
3.3. Influencia del mecanismo químico

El mecanismo químico para la combustión de metano consta de 53 especies distintas mientras que el software utilizado permite un máximo de 50 especies. Este hecho hace que sea necesaria la utilización de un mecanismo reducido. En el Apartado 2.1 se muestran los distintos mecanismos a emplear y en el Anexo C se muestran las reacciones para cada uno de los modelos.

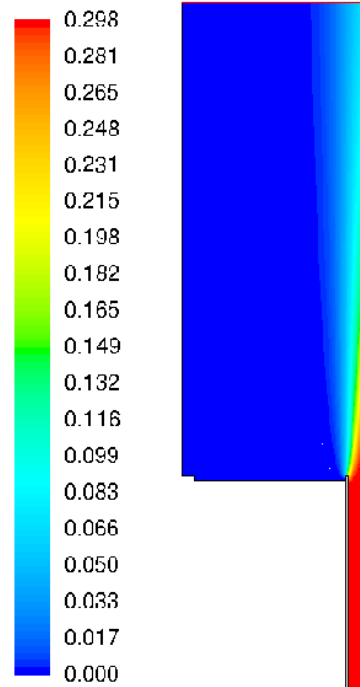
Para comparar los distintos mecanismos reducidos con los datos experimentales se ha utilizado una malla ortogonal sin refinar, el modelo de difusión multicomponente y la herramienta ISAT. El estudio se realizará para una llama parcialmente premezclada.

En la figura 3.6 se observa como cada uno de los modelos tiene un comportamiento distinto. En todos los modelos se calcula correctamente la posición de máxima temperatura pero se sobrestima su valor.

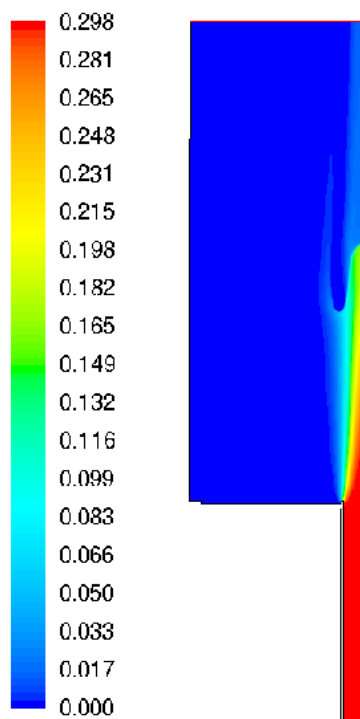
El modelo de Smooke tiene una pendiente mayor al comienzo de la llama, por lo que estamos ante una velocidad de reacción mayor que los otros mecanismos. Los datos experimentales tienen una velocidad de combustión menor por lo que tiene una pendiente menor.



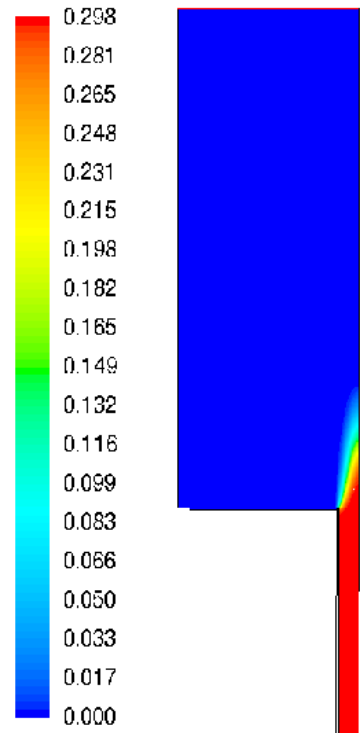
(a) Ley de Fick sin combustión



(b) Difusión multicomponente sin combustión



(c) Ley de Fick con combustión



(d) Difusión multicomponente con combustión

Figura 3.5: Perfiles de la fracción másica de metano

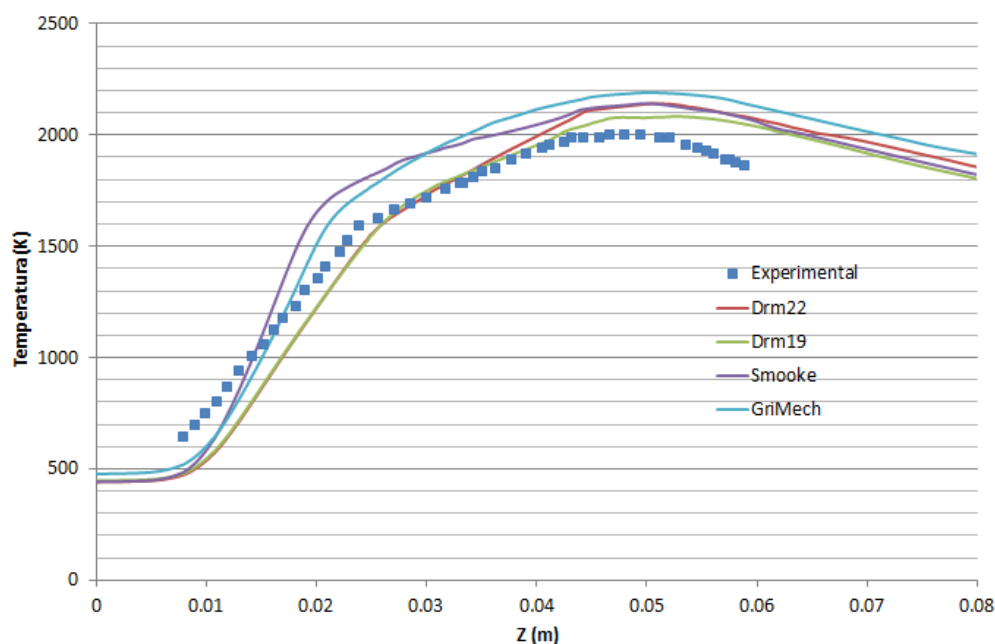


Figura 3.6: Gráfico de la temperatura en el eje comparando los distintos mecanismos utilizados para $\phi = 6,2$

El mecanismo del GriMech es el mecanismo que consta de más compuestos y reacciones por lo que es el más parecido al mecanismo no simplificado. Este mecanismo capta tanto los cambios de pendiente como el punto de temperatura máxima. La velocidad de reacción es menor que la obtenida con el modelo de Smooke al obtener una pendiente menor. La temperatura máxima es la más elevada entre todos los mecanismos utilizados, 200K por encima de los datos experimentales.

Por último los mecanismos Drm22 y Drm19 tienen la misma forma a lo largo del eje que los datos experimentales, por lo que se predice correctamente la velocidad de reacción. De la misma forma que en los otros métodos, la posición de la temperatura máxima se predice correctamente con ambos mecanismos. La diferencia entre ambos es la predicción de la temperatura máxima, el Drm19 sobrestima la temperatura máxima 50K menos que el Drm22.

En la tabla 3.3 se pueden observar los diferentes tiempos por iteración obtenidos para cada mecanismo químico. El tiempo por iteración aumenta al incrementarse el número de especies y reacciones. Debido a que el tiempo por iteración entre el Drm19 y el Drm22 son semejantes, y ambos mecanismos se ajustan correctamente a los datos experimentales, son dos mecanismos válidos para este caso. Para futuras simulaciones se utilizará el Drm22 como mecanismo químico.

	Smooke	Drm19	Drm22	GriMech
Tiempo por iteración (s/it)	1.9	2.6	2.7	13.4
Número de especies	16	19	22	49

Tabla 3.3: Tiempos por iteración para cada mecanismo químico

3.4. Influencia del método de resolución de la cinética química

En el Apartado 2.1 se han mostrado las ecuaciones necesarias para resolver la cinética química. Una de las principales variables en las ecuaciones es el número de especies químicas involucradas así como el número de reacciones. Desde el punto de vista de la cinética química esta es la etapa lenta, por lo que si queremos reducir el tiempo total de cálculo se tiene que optimizar el tiempo empleado en esta etapa.

Para elegir correctamente un método de resolución de la cinética química es necesario llegar a un compromiso entre tiempo de cálculo y exactitud respecto a los datos experimentales.

Para estudiar la influencia de cada uno de los métodos de resolución se ha utilizado una malla ortogonal sin refinar y la difusión multicomponente como forma de resolver el flujo difusivo. Se han realizado simulaciones para llamas totalmente premezcladas, parcialmente premezcladas y llamas de difusión.

Para una llama parcialmente premezclada se ha obtenido la figura 3.7. En esta figura se observa que el método de resolución no influye en los datos obtenidos computacionalmente. En todos los métodos se obtienen unos resultados similares con la excepción de que con el método de integración directa utilizando la herramienta Stiff la temperatura máxima se sobrestima en menor medida.

En el Anexo D.3 se pueden observar las figuras para las fracciones molares de metano, oxígeno y dióxido de carbono así como las figuras para llamas completamente premezcladas y llamas de difusión.

En la tabla 3.4 se muestran los tiempos por iteración para cada uno de los métodos utilizados. Para tener un compromiso entre tiempo de cálculo y precisión se ha elegido ISAT como método de resolución de la cinética química para posteriores simulaciones. De esta forma obtenemos el menor tiempo por iteración y una precisión similar a los otros métodos.

	Integración directa	Integración directa con Stiff	ISAT
Tiempo por iteración (s/it)	15.8	47.8	2.7

Tabla 3.4: Tiempos por iteración para cada método de resolución de la cinética química

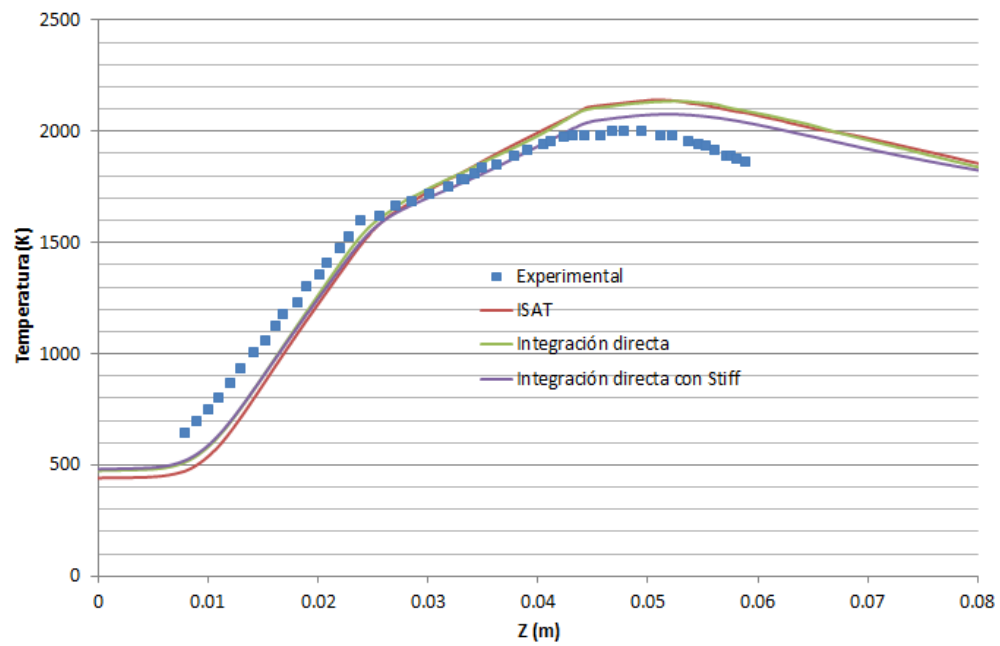


Figura 3.7: Temperatura en el eje comparando los distintos submodelos para la resolución de la cinética química

Capítulo 4

Análisis del sistema llama-pared

En este apartado se presentan los resultados obtenidos en la simulación del sistema llama-pared y su comparación con datos experimentales obtenidos del artículo de Hou y Ko [5].

El objetivo de este capítulo es validar las conclusiones obtenidas en el capítulo 3 utilizando una geometría que se asemeja a un quemador doméstico real.

Uno de los aspectos más relevantes en el diseño de un quemador doméstico es la producción de monóxido de carbono, por ello se va a realizar un estudio comparando la producción de CO en cada caso. Por último se analizará la influencia en el método de cálculo de la conductividad térmica.

4.1. Validación del sistema llama-pared

En el artículo hay datos experimentales de temperaturas para distintas alturas entre la pared y el tubo de salida de la mezcla aire/combustible (12, 23 y 30 mm) y diferentes inclinaciones respecto de la horizontal (90° , 60° y 30°). Debido a todo el rango de opciones hay un total de nueve casos distintos que se van a analizar en función de la inclinación.

Las temperaturas obtenidas del artículo se han tomado sin tener en cuenta la radiación por lo que se han corregido mediante la ley de Stefan-Boltzmann.

4.1.1. Llama a 90°

Para el caso de la llama a 90° se dispone de datos experimentales de temperaturas radiales en función de la altura (eje z) para cada una de las distancias establecidas.

Distancia 12 mm En la figura 4.1 se puede observar el perfil de temperatura obtenido computacionalmente cuando la distancia entre la pared y el conducto de salida del metano es de 12 mm y el contorno proporcionado por el artículo de Hou y Ko [5].

La figura 4.2 muestra una gráfica comparativa entre los datos computacionales y experimentales para una altura de 6 mm, las gráficas comparativas que recogen el resto de los casos se encuentran en el anexo E.1.1.

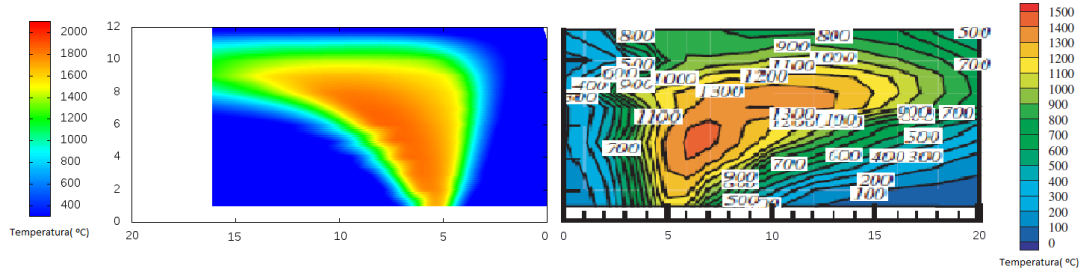


Figura 4.1: Contornos de isotermas en el plano r-z para un ángulo de 90° y $H=12$ mm. Contorno obtenido computacionalmente (izq.). Contorno obtenido en el artículo de Hou y Ko [5] (dcha.).

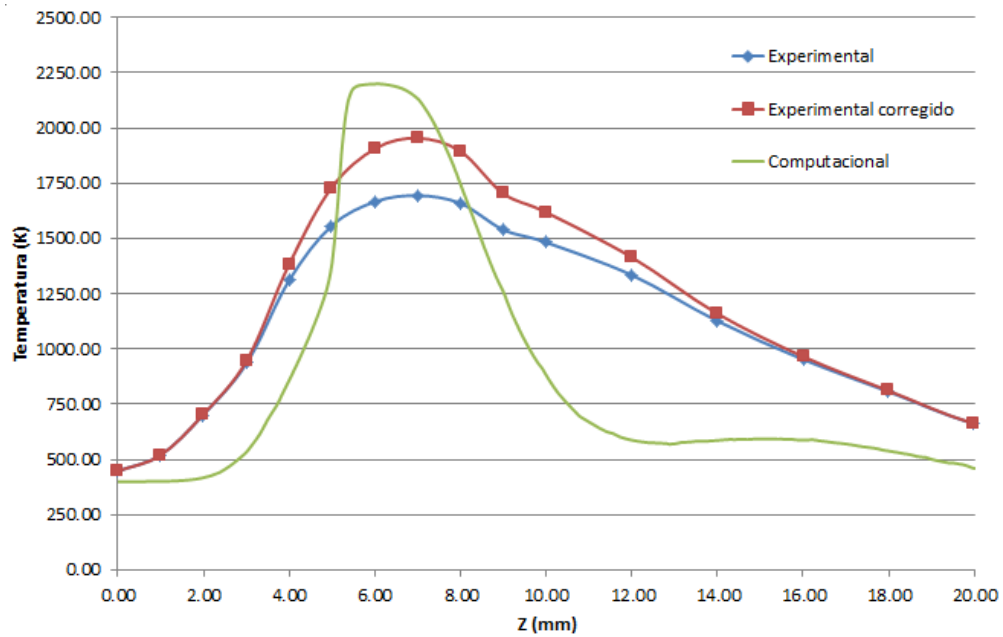


Figura 4.2: Gráfico comparativo para una altura de 6 mm y $H=12$ mm

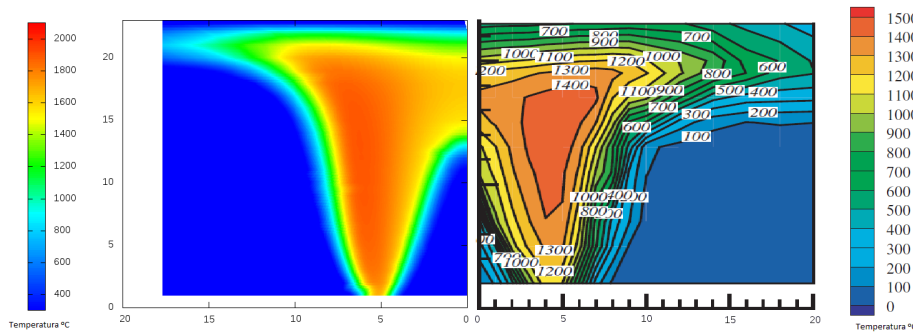


Figura 4.3: Contornos de isotermas en el plano r-z para un ángulo de 90° y $H=23$ mm. Contorno obtenido computacionalmente (izq.). Contorno obtenido en el artículo de Hou y Ko [5] (dcha.)

Se puede observar como los datos de la simulación se aproximan a los datos experimentales corregidos con la salvedad de que en los datos computacionales se observa un aumento y una disminución más rápida de la temperatura en función de la posición radial.

Cuando la altura es de 12 mm los datos computacionales no se ajustan, ya que en la simulación esta altura corresponde a la pared refrigerada en la que impacta la llama, por tanto tiene una temperatura más o menos constante a lo largo del radio. En esta posición, los datos experimentales muestran fluctuaciones en la temperatura lo que señala que la pared no está perfectamente refrigerada como se supone en la simulación.

Distancia 23 mm En la figura 4.3 se muestra el perfil de temperatura obtenido computacionalmente para esta configuración de llama y el contorno obtenido del artículo de Hou y Ko.

De la misma forma que en el caso de 12 mm se tienen varias gráficas comparando los datos experimentales y los datos computacionales, en la figura 4.4 se tiene la gráfica comparativa para una altura de 11 mm y en el anexo E.1.2 se tienen las gráficas correspondientes al resto de alturas.

En estas se puede observar cómo el ajuste de los datos se aproxima al principio y final de la llama pero se sobrestima la temperatura máxima.

Distancia 38 mm Para una distancia de 38 mm entre el tubo y la pared se ha obtenido la figura 4.5. En esta figura se puede observar como la llama apenas alcanza la pared pareciéndose mucho a las llamas laminares del capítulo 3.

Si observamos la gráfica 4.6 y las gráficas del anexo E.1.3 se observa la misma tendencia vista en las gráficas de $H=12$ mm y $H=23$ mm. Hay un buen ajuste

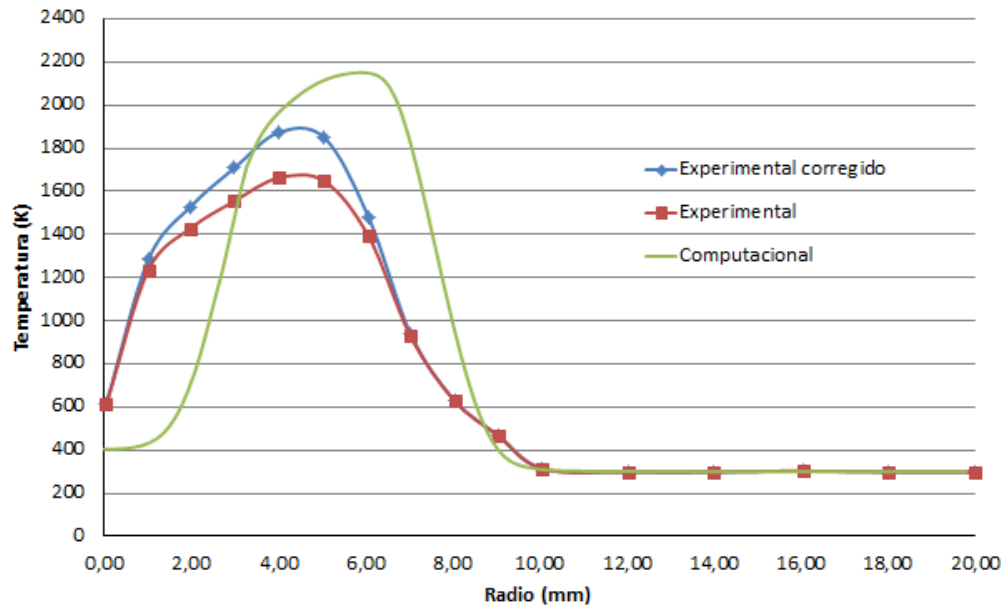


Figura 4.4: Gráfico comparativo para una altura de 11 mm y H=23 mm

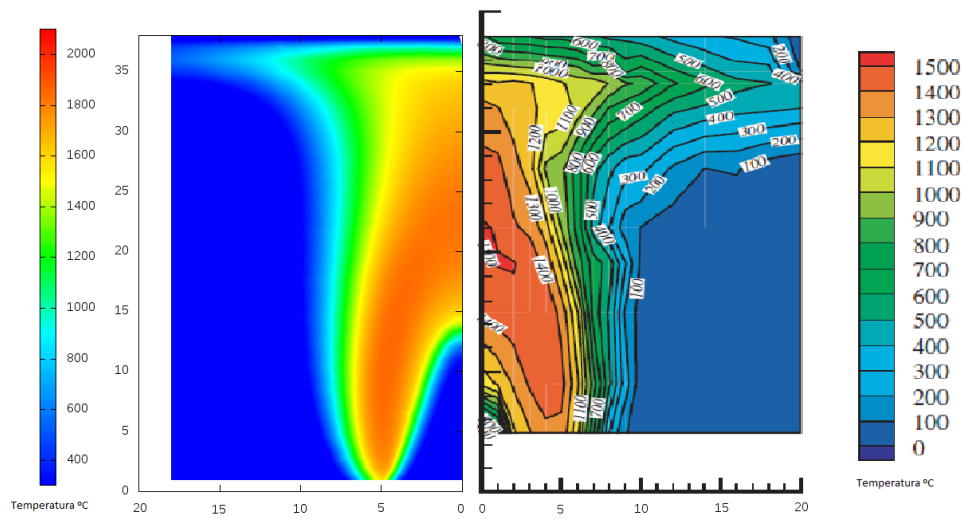


Figura 4.5: Contornos de isotermas en el plano r-z para un ángulo de 90° y H=38 mm. Contorno obtenido computacionalmente (izqa.). Contorno obtenido en el artículo de Hou y Ko [5] (dcha.)

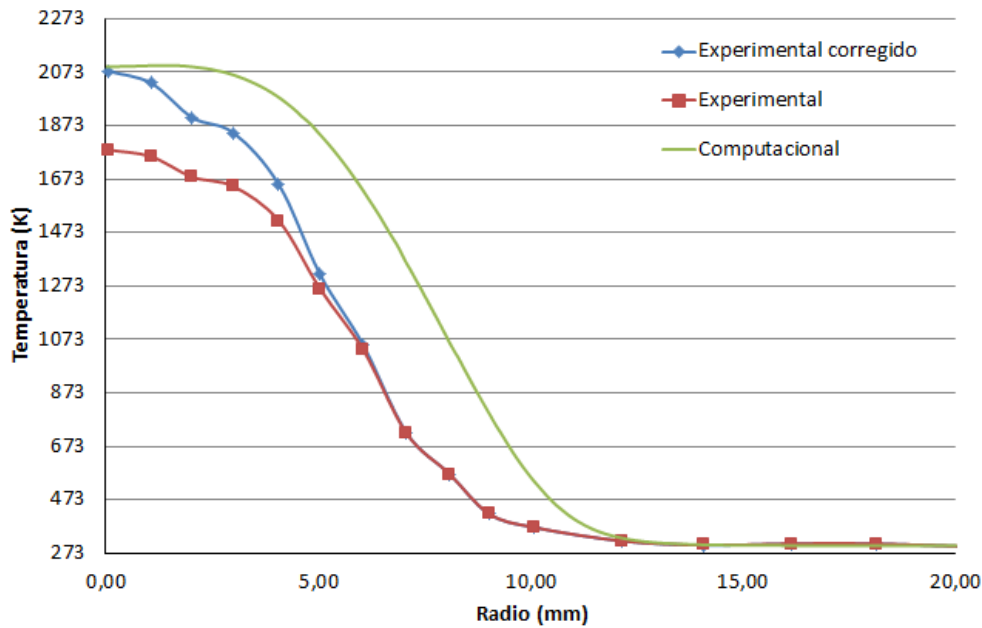


Figura 4.6: Gráfico comparativo para una altura de 22 mm y H=38 mm

al principio y final de la llama pero la temperatura máxima se supera en 100K aproximadamente.

Se puede observar cómo varía la forma de la llama dependiendo de la altura entre el conducto y la pared, de tal forma que para una altura baja (12 mm) se tiene una llama que impacta por completo contra la pared incluso llega a sobresalir por los lados del plato refrigerado. Por el contrario, para la llama de 38 cm se ve como la llama impacta muy poco con la pared refrigerada y por lo tanto se obtiene una llama muy parecida a las del capítulo 3. La llama de 23 mm de altura está en un estado intermedio entre ambas.

Como se ha comentado para cada una de las llamas, la validación es correcta para el principio y el final de la llama pero en todos los casos la temperatura máxima de la llama está por encima del valor experimental.

4.1.2. Llama de 60°

Para la llama de 60° se disponen de datos experimentales de temperaturas radiales (eje x o radial) en función de la posición longitudinal (eje y) y de la altura (eje z). Los datos experimentales están distribuidos en dos alturas para las cuales hay ocho medidas longitudinales. Debido a la gran cantidad de datos experimentales sólo se mostrarán los más representativos en este apartado.

De forma análoga al apartado anterior las comparaciones se realizan con los datos experimentales y los datos experimentales corrigiendo la temperatura debido a la radia-

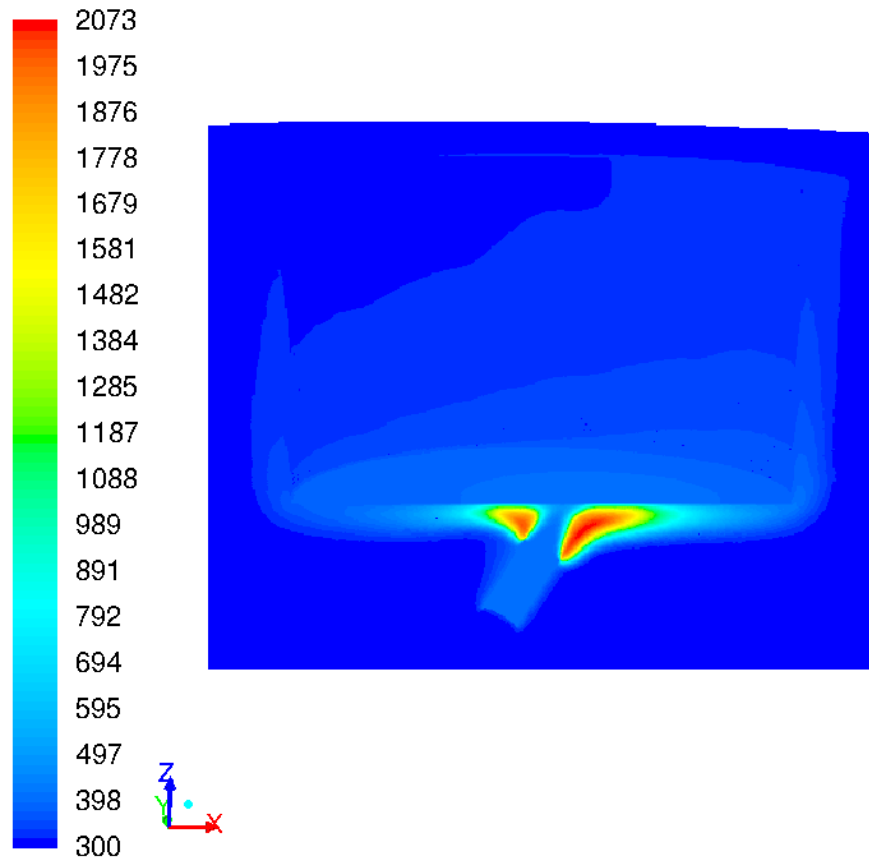


Figura 4.7: Perfil de temperaturas para $H=12$ cm y 60° de inclinación

ción.

Distancia 12 mm En la figura 4.7 se observa el contorno de temperaturas para esta configuración. En este caso la inclinación del conducto de entrada provoca que un lado de la llama sea más pequeño que el otro, disminuyendo la temperatura en esa zona de la llama.

En la figura 4.8 se observan dos máximos correspondientes a la temperatura máxima alcanzada y un mínimo en la zona que no hay combustión entre ambas llamas. Los datos obtenidos computacionalmente siguen la misma forma que los datos experimentales. Tanto la temperatura máxima alcanzada como la temperatura mínima no se predicen correctamente, habiendo 200K de diferencia entre ellas.

En la figura 4.9 se comparan las temperaturas en el plato refrigerado. En nuestro caso la temperatura es casi constante en todo el plato debido a la condición de contorno, mientras que los datos experimentales tienen elevados gradientes debido a que la refrigeración del plato no es perfecta.

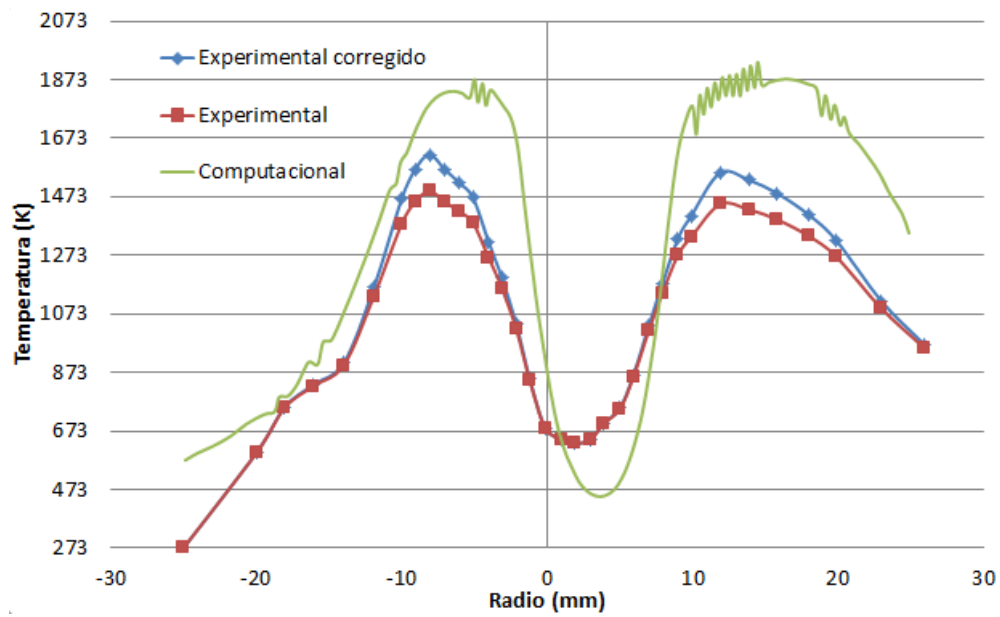


Figura 4.8: Gráfico comparativo de $H=12$ mm y 60° para una altura (z) de 9 mm y una posición longitudinal (y) de 0 mm

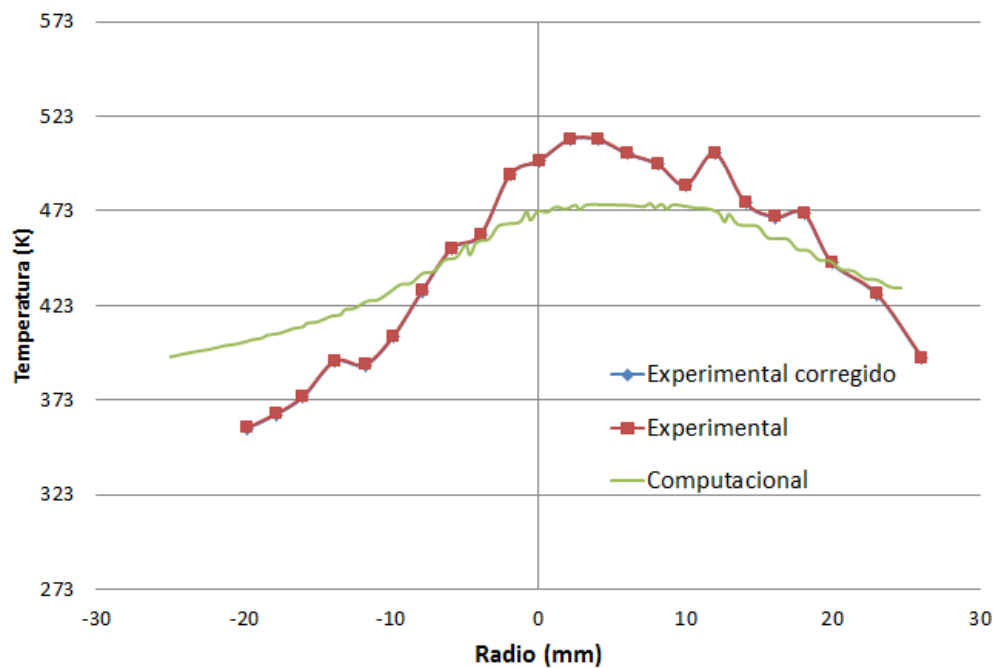


Figura 4.9: Gráfico comparativo de $H=12$ mm y 60° para una altura (z) de 12 mm y una posición longitudinal (y) de 16 mm

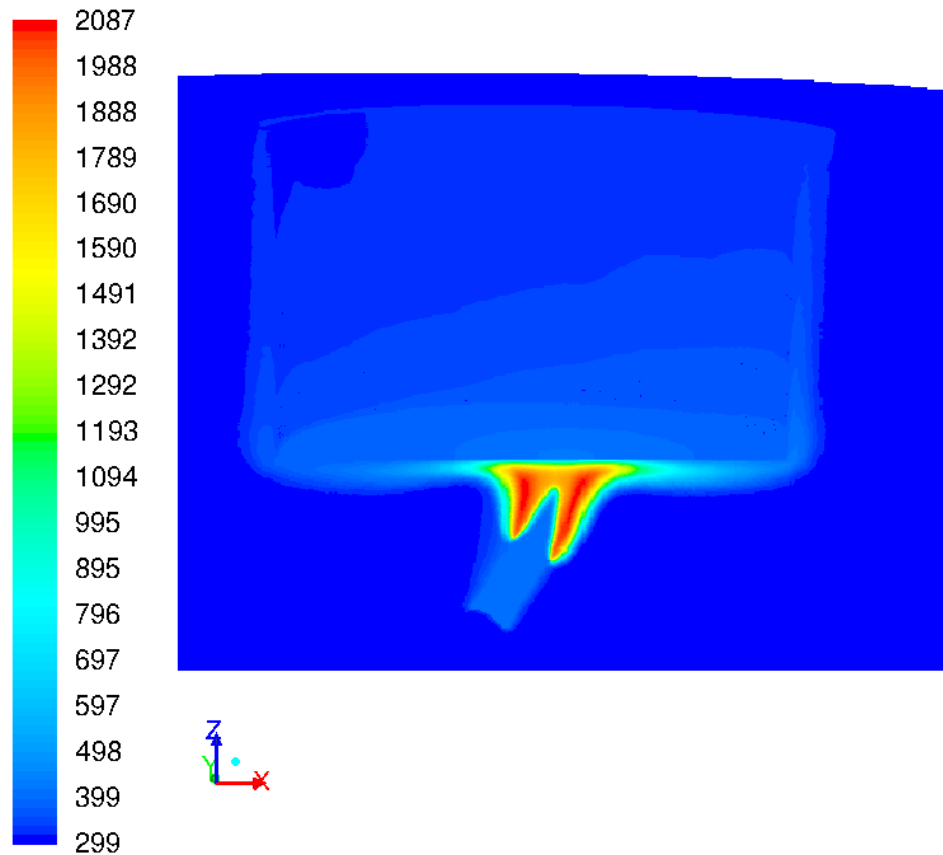


Figura 4.10: Perfil de temperaturas para $H=23$ mm y 60° de inclinación

En resto de gráficas de ambos casos se encuentran en el anexo E.2.1.

Distancia 23 mm Si observamos la figura 4.10 se ve cómo la llama asciende por el borde derecho del plato, mientras que por el lado izquierdo la llama no es capaz de ascender debido a la inclinación y la altura del conducto de entrada.

En lo referente a los perfiles, se muestran dos perfiles: la figura 4.11 y la figura 4.12. En la primera se están midiendo las temperaturas a 3 mm por debajo del plato refrigerado y a 2 mm en el eje longitudinal y en la segunda figura se mide en el plato y a 2 mm en el eje longitudinal.

Comparando estas gráficas y las correspondientes a este caso pero variando la posición longitudinal, que se encuentran en el subapartado E.2.2, se puede observar que cuando comparamos a 3 mm del plato y con una baja distancia longitudinal se consigue ajustar los datos computacionales a los experimentales, sin embargo, al alejarnos longitudinalmente del eje se tiene una tendencia parecida pero con una diferencia de unos 400K más.

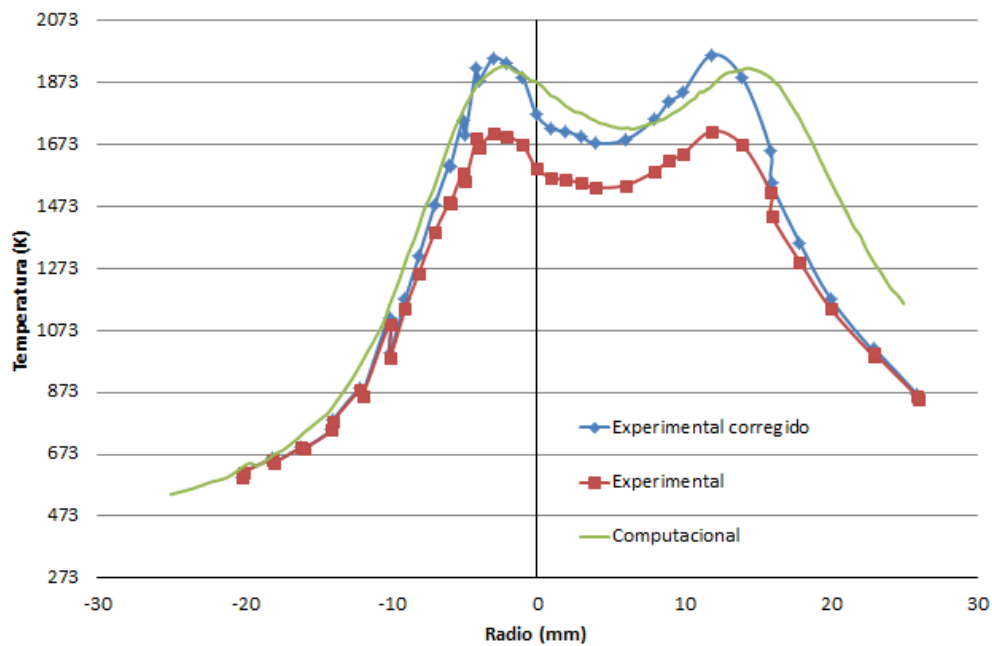


Figura 4.11: Gráfico comparativo de $H=23$ mm y 60° para una altura (z) de 20 mm y una posición longitudinal (y) de 2 mm

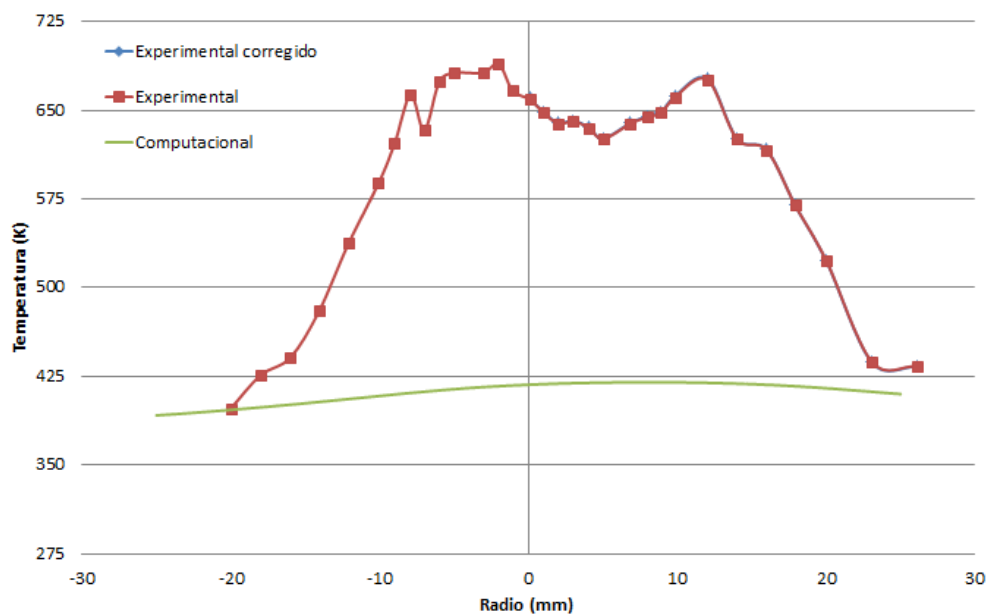


Figura 4.12: Gráfico comparativo de $H=23$ mm y 60° para una altura (z) de 23 mm y una posición longitudinal (y) de 2 mm

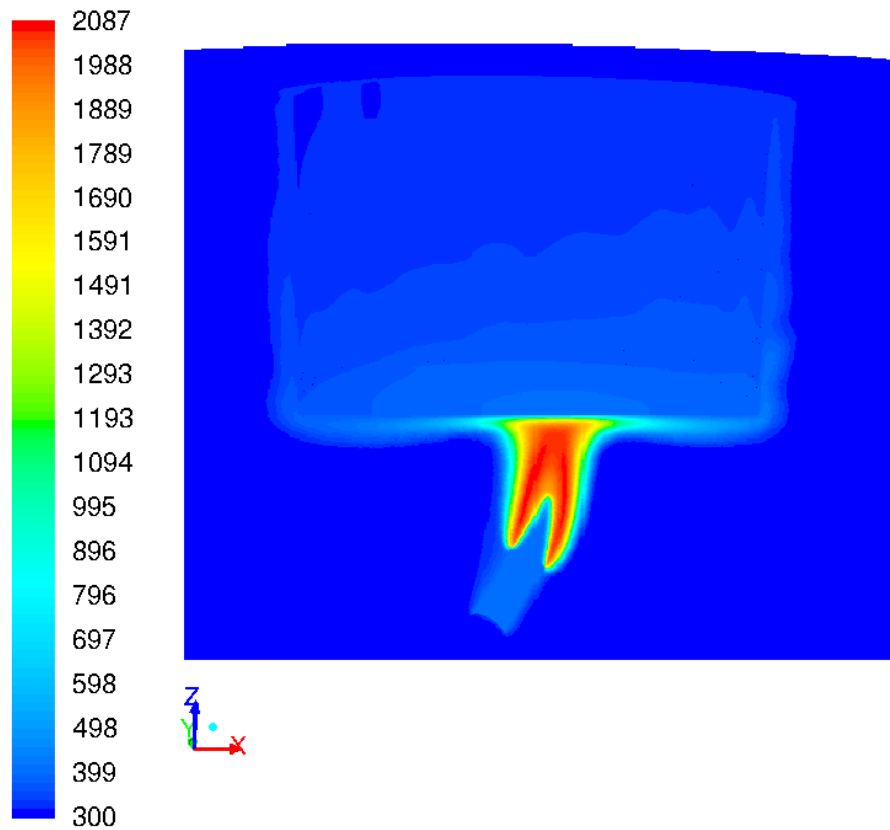


Figura 4.13: Perfil de temperaturas para $H=38$ mm y 60° de inclinación

Por otro lado en las gráficas correspondientes al plato se observa cómo los datos experimentales y computacionales no se ajustan. Esto es debido a la condición de contorno que hace que el plato esté refrigerado, por ello la temperatura se mantiene constante en los datos computacionales y sin embargo, los datos experimentales varían.

Distancia 38 mm Al observar la figura 4.13 se percibe la misma forma que se puede observar en el caso de 90° y 38 mm, con la diferencia de que en este caso, la inclinación del conducto hace que la llama se dirija hacia la derecha.

Se muestran dos perfiles de temperaturas, la figura 4.14 representa el perfil de temperatura a una altura de 35 mm del tubo en el eje de la llama, mientras que en la figura 4.15 se están representando los datos a una altura de 38 mm (sobre el plato refrigerado) y a una distancia de 16 mm en el eje longitudinal. Las gráficas correspondientes al resto de datos se encuentra en el anexo E.2.3

En las gráficas correspondientes a una posición axial de 35 mm se ha capturado la forma de la llama, pero hay una diferencia de temperatura entre los datos experi-

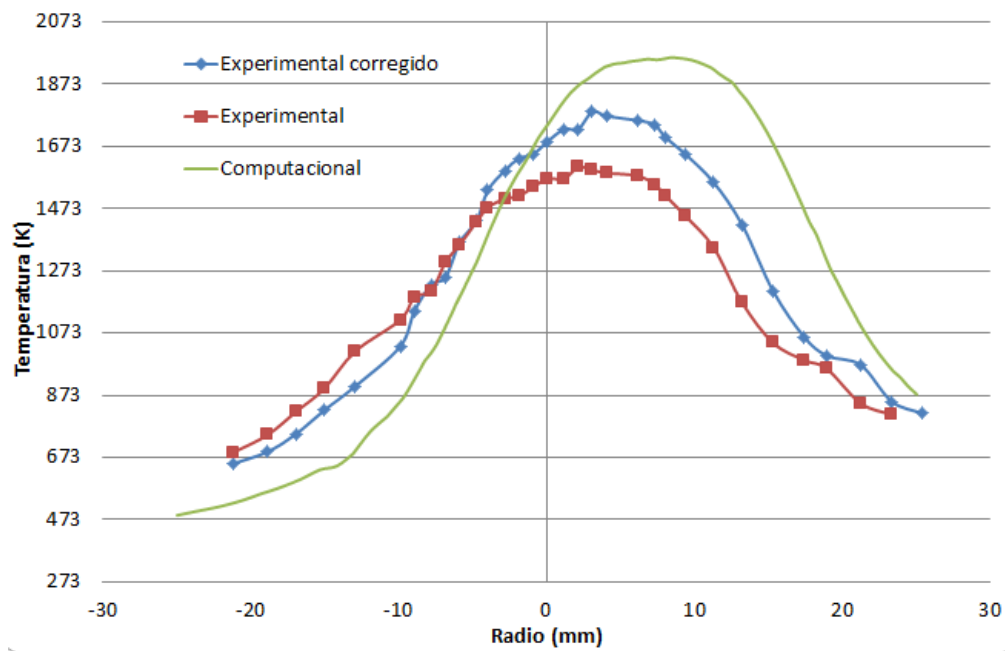


Figura 4.14: Gráfico comparativo de $H=38$ mm para una altura (z) de 35 mm y una posición longitudinal (y) de 0 mm

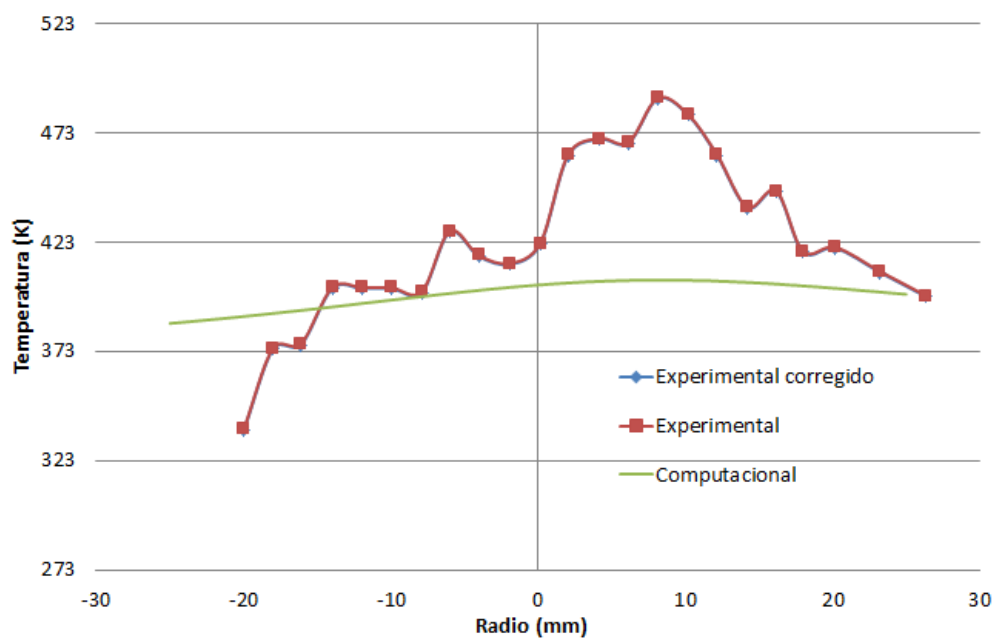


Figura 4.15: Gráfico comparativo de $H=38$ mm y 60° para una altura (z) de 38 mm y una posición longitudinal (y) de 16 mm

mentales y computacionales que aumenta al separarnos de la llama. De la misma forma que en el caso anterior, el efecto de la radiación va disminuyendo al alejarnos del centro de la llama, haciendo que los datos experimentales y los datos corregidos no varíen significativamente.

En la gráfica en la que se comparan los datos en el plato refrigerado se puede observar cómo cuanto más avanzamos en el eje longitudinal, más se parecen los datos experimentales a los computacionales. Teniendo en cuenta que estos datos computacionales no varían debido a la condición de contorno de refrigeración, se puede llegar a la conclusión de que la refrigeración del plato es más eficaz al estar más alejado del centro de la llama.

4.1.3. Llama de 30°

El caso de que el tubo tenga una inclinación de 30° está contemplado en el artículo de Hou y Ko [5] pero no se dispone de datos experimentales. Los perfiles de temperatura obtenidos computacionalmente se pueden observar en el anexo E.3

4.2. Comparación del CO producido

Gracias a la simulación de este sistema se va a observar cómo varía la formación de monóxido de carbono. Aunque no se tengan datos experimentales de este compuesto es importante observar la variación de CO para las distintas configuraciones porque a la hora de diseñar un quemador comercial el valor de este compuesto tiene que ser lo más bajo posible.

En esta sección se va a comparar el monóxido de carbono producido en cada una de las geometrías para establecer cuál es la mejor forma de colocar un quemador para que la cantidad de CO sea mínima. La cantidad de CO emitida es muy importante ya que está legislada y no puede superar unos valores determinados.

En la tabla 4.1 se comparan los valores de la fracción molar de monóxido de carbono máximos obtenidos en cada configuración.

$\theta \backslash H$	12 mm	23 mm	38 mm
90°	0.047	0.048	0.043
60°	0.075	0.074	0.073
30°	0.074	0.073	0.072

Tabla 4.1: Tabla de la fracción molar máxima de CO

La mejor de estas configuraciones es tener la llama a 90° ya que es la que produce una menor cantidad de CO, mientras que tener la llama a 60° produce la máxima cantidad de monóxido de carbono. Por tanto, si tenemos una altura de llama del orden de los 12 mm la mejor disposición para minimizar la cantidad de CO es tener la llama a 90°.

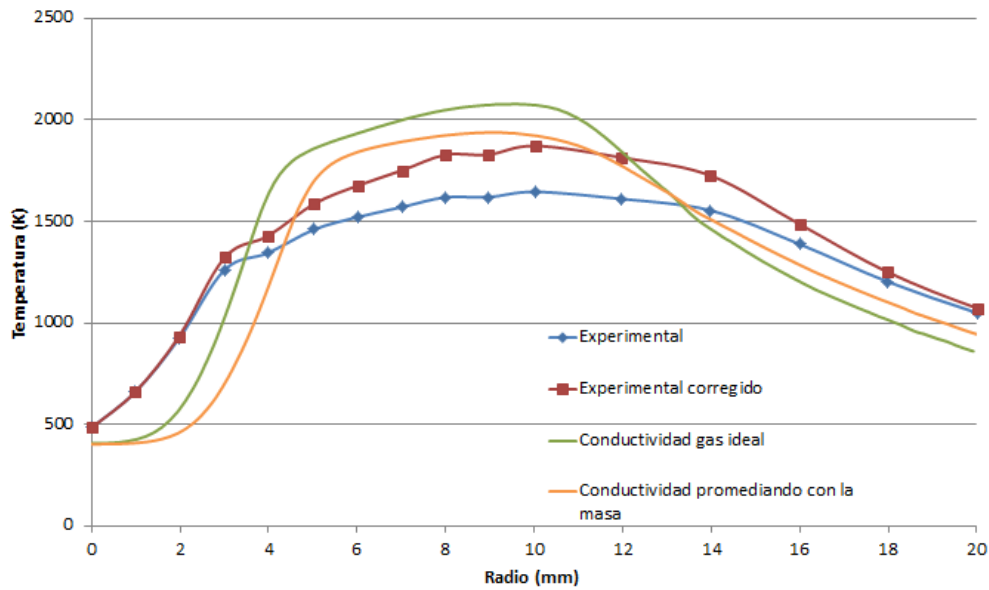


Figura 4.16: Gráfico comparativo para la conductividad para una altura de 12 mm y 90°

Para una altura de 23 mm la forma de tener una menor cantidad de CO es con la llama a 90°. Se han obtenido fracciones molares similares para $H = 23$ mm y un ángulo de 60° y 30°.

Hay que tener en cuenta que al tener un plato refrigerado la cantidad de CO producida es mucho mayor que la obtenida en un quemador de cocina convencional.

4.3. Influencia de la conductividad térmica

Hasta ahora la conductividad térmica se ha calculado mediante la teoría cinética según la ley de los gases ideales. Dentro de la teoría cinética podemos no considerar la mezcla de gases como ideal, por lo que calcularemos la conductividad promediando con la masa. La ecuación a resolver es la ecuación A.19.

En la figura 4.16 se observa que al calcular la conductividad térmica promediando con la masa la temperatura máxima disminuye. Al utilizar este método de cálculo la llama se forma más tarde que al utilizar el método de gas ideal.

Capítulo 5

Conclusiones

Con ayuda de la fluidodinámica computacional se han podido simular dos llamas sencillas, una llama de laboratorio laminar y un sistema de llama-pared.

La simulación de quemadores de gas es una práctica que realizan la mayoría de empresas dedicadas a la fabricación de estos dispositivos. La variedad de software y submodelos matemáticos para los distintos fenómenos físicos hace difícil y costoso la realización de estas simulaciones.

El estudio realizado en este proyecto da lugar a una serie de conclusiones en lo referente a los distintos submodelos matemáticos:

- Se ha visto como la malla no tiene una gran influencia en los resultados obtenidos ya que si bien es necesario tener una malla fina, no es necesario que ésta sea excesivamente refinada para obtener unos resultados aceptables.
- La difusión multicomponente es necesaria, aunque el coste computacional sea mayor ya que para este tipo de simulaciones la ley de Fick no es aplicable.
- El mejor método para resolver la cinética química del sistema es la herramienta ISAT proporcionada por ANSYS-FLUENT. Este método permite resolver la química con precisión y aumentar la velocidad de la simulación.
- El mejor mecanismo químico es el Drm22 debido a que logra predecir todos los cambios de pendiente así como la forma de la llama.
- Los submodelos elegidos no sólo funcionan bien en la llama laminar, sino también en el sistema llama-pared en determinadas situaciones.
- Con la configuración de $\theta = 90^\circ$ y $H=38$ mm se obtiene la cantidad mínima de monóxido de carbono producida debido a la pared.

Aunque los resultados obtenidos son satisfactorios para los objetivos y el alcance del presente proyecto, hay varios aspectos susceptibles de mejorar:

- Es necesario utilizar otro software distinto a ANSYS-FLUENT debido a la restricción del número de especies. De esta forma será posible simular la combustión de butano y se podrá colaborar con el desarrollo de modelos matemáticos más parecidos a la realidad que puedan ser utilizados para desarrollar nuevos quemadores domésticos.
- Las condiciones de contorno en el caso del sistema llama-pared tienen que modificarse teniendo en cuenta que el plato refrigerado no es ideal y por lo tanto no evacua todo el calor que recibe.
- Utilizar distintas geometrías para validar correctamente todos los modelos utilizados y de esta forma poder simular un quemador real y tener un modelo que represente lo mejor posible los fenómenos que ocurren en un quemador. Una vez realizado el modelo físico y matemático el único aspecto que habría que cambiar a la hora de diseñar un dispositivo real sería la geometría.
- Desarrollar una nueva forma de tabulación que funcione mejor que ISAT con el objetivo de poder resolver la cinética química de forma más eficiente e intentando disminuir el coste computacional.

Para realizar alguno de estos trabajos futuros son necesarios avances el campo de la informática desarrollando, por ejemplo, procesadores más potentes que los actuales para que los tiempos de cálculo se puedan llevar a cabo.

Apéndice A

Ecuaciones

A.1. Ecuaciones de transporte

Las ecuaciones que describen la llama aislada y el sistema llama-pared se enumeran a continuación:

1. Ecuación de conservación de materia:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (\text{A.1})$$

2. Ecuación de conservación de momento:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} + \rho f_i \quad (\text{A.2})$$

Donde p es la presión estática, τ_{ij} es el tensor de esfuerzos viscosos y f_i son las fuerzas gravitacionales y fuerzas debidas a cuerpos externos.

3. Ecuación de consevación de la energía:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}[\rho u_i (\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{eff} \frac{T}{\partial x_i} - \sum_j (j_{\alpha j} H_{\alpha}) \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h \quad (\text{A.3})$$

Donde k_{eff} es la conductividad térmica efectiva ($k + k_t$ siendo k_t la conductividad térmica turbulenta que en nuestro caso es nula debido a que las simulaciones son en régimen laminar) y j_{α} es el flujo difusivo de la especie α .

4. Ecuación de transporte de las especies:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i y_{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{\alpha, m} \frac{\partial y_{\alpha}}{\partial x_i} \right) = R_{\alpha} \quad (\text{A.4})$$

Donde $\alpha = 1 \dots N_{especies}$ y R_{α} viene dado por el mecanismo de reacción.

A.2. Ecuaciones para la resolución de la cinética química

Si consideramos la forma general de reacción como se muestra en la ecuación:

$$\sum_{i=1}^N v'_{i,r} \mathcal{M}_i \xrightarrow{k_{f,r}} \sum_{i=1}^N v''_{i,r} \mathcal{M}_i \quad (\text{A.5})$$

donde,

- N = número de especies químicas en el sistema
- $v'_{i,r}$ = coeficiente estequiométrico del reactante i en la reacción r
- $v''_{i,r}$ = coeficiente estequiométrico del producto i en la reacción r
- \mathcal{M}_i = símbolo que denota la especie i
- $k_{f,r}$ = constante de reacción directa para la reacción r

El término fuente neto de la especie i debido a la reacción, se calcula como la suma de los términos fuente de Arrhenius sobre el número de reacciones en que participan las especies:

$$R_\alpha = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{\alpha,r} \quad (\text{A.6})$$

Donde $\hat{R}_{\alpha,r}$ es el ratio molar de Arrhenius de creación/destrucción de especie i en la reacción r .

La constante de reacción directa se calcula mediante la expresión de Arrhenius:

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_a/RT} \quad (\text{A.7})$$

En caso de que la reacción sea irreversible la constante de reacción inversa se calcula usando la siguiente relación:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \quad (\text{A.8})$$

Siendo $K_r = \exp\left(\frac{\Delta S_r}{R} - \frac{\Delta H_r}{RT}\right) \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{i=1}^N (v''_{i,r} - v'_{i,r})}$

Una aproximación de R_i para acelerar el cálculo:

$$R_i^* = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau R_i dt \quad (\text{A.9})$$

donde τ es el paso temporal.

A.3. Discretización

En el proceso de discretización se define una ecuación para el transporte de una variable ϕ , escrito en forma integral para un volumen de control arbitrario (V) limitado por una superficie (A) como se muestra en la ecuación:

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \oint \rho \phi \vec{u} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla \phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \quad (\text{A.10})$$

A esta ecuación integral se le realiza una discretización espacial y considerando que las simulaciones se llevan a cabo en estado estacionario obtenemos la ecuación

$$\sum_f \rho_f \phi_f \vec{u}_f \cdot d\vec{A}_f = \sum_f \Gamma_\phi (\nabla \phi)_f \cdot d\vec{A}_f + S_\phi V \quad (\text{A.11})$$

Una vez resuelta la ecuación A.11 se obtiene el valor de ϕ en el centro de la celda. Para calcular el valor de la variable en las caras (ϕ_f) del volumen de control se requiere un esquema de interpolación. Se ha utilizado un esquema de segundo orden upwind por lo que el valor ϕ_f se calcula como se muestra en la ecuación

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \vec{r} \quad (\text{A.12})$$

El gradiente de la ecuación A.12 se evalúa utilizando el método de mínimos cuadrados, el cual asume que la solución varía linealmente desde el centro del volumen hasta el centro del volumen vecino [9]. Si aplicamos la ecuación A.12 a la ecuación A.11 la expresión resultante depende de la variable escalar desconocida ϕ en el centro de la celda así como los valores desconocidos de las celdas vecinas. Esta ecuación, generalmente, es no lineal en estas variables y se linealiza como se muestra en la ecuación

$$a_p \phi = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (\text{A.13})$$

A.4. Estimación de propiedades

Para la estimación de las propiedades de los elementos se ha utilizado la teoría cinética. A continuación se muestran las ecuaciones utilizadas en cada caso:

1. Cálculo de la viscosidad.

Para calcular la viscosidad de un elemento utilizamos:

$$\mu_i = 2,67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_w T}}{\sigma^2 \Omega_\mu} \quad (\text{A.14})$$

Donde, $\mu(kg/m \cdot s) = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}}$, $T(K)$, $\Omega_\mu = \Omega_\mu(T^*)$ con $T^* = \frac{T}{\epsilon/k_B}$. Los parámetros σ y ϵ/k_B son los parámetro de Lennard-Jones.

En el caso de calcular la viscosidad de la mezcla tenemos:

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}} \quad (\text{A.15})$$

Donde, $\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{M_{w,i}}{M_{w,j}}\right)\right]^{1/2}}$ y X_i es la fracción molar de la especie i .

2. Conductividad térmica.

Para calcular la conductividad de un elemento tenemos:

$$k_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_w} \mu \left[\frac{4}{15} \frac{c_p M_w}{R} + \frac{1}{3} \right] \quad (\text{A.16})$$

Donde, R es la constante de los gases, M_w es el peso molecular, μ es la viscosidad y c_p es la capacidad calorífica.

Para la conductividad térmica de una mezcla utilizamos:

$$k = \sum_i \frac{X_i k_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}} \quad (\text{A.17})$$

Donde,

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{M_{w,i}}{M_{w,j}}\right)\right]^{1/2}} \quad (\text{A.18})$$

y X_i es la fracción molar de la especie i .

En el caso de no considerar la mezcla de gases como ideal, la conductividad se calcula:

$$k = \sum_i Y_i k_i \quad (\text{A.19})$$

3. Coeficiente difusivo.

Para calcular el coeficiente difusivo utilizamos la ecuación de Chapman-Enskog modificada:

$$D_{ij} = 0,00188 \frac{\left[T^3 \left(\frac{1}{M_{w,i}} + \frac{1}{M_{w,j}}\right)\right]^{\frac{1}{2}}}{P_{abs} \sigma_{ij}^2 \Omega_D} \quad (\text{A.20})$$

Donde,

$$\begin{aligned}
P_{abs} &= \text{presión absoluta} \\
\Omega_D &= \text{integral de colisión difusiva (medida} \\
&\text{de la interacción de las moléculas en el sistema) dependiente de } T_D^* \text{ siendo:} \\
T_D^* &= \frac{T}{(\epsilon/k_B)_{ij}} \\
k_B &= \text{constante de Boltzmann} \\
(\epsilon/k_B)_{ij} &= \sqrt{(\epsilon/k_B)_i(\epsilon/k_B)_j} \\
\sigma_{ij} &= \text{es calculado como la media aritmética de los } \sigma \\
&\text{individuales}
\end{aligned}$$

4. Capacidad calorífica.

La capacidad calorífica de la mezcla la calculamos:

$$c_p = \sum_i Y_i c_{p,i} \quad (\text{A.21})$$

Para los compuestos mayoritarios utilizamos polinomios dependientes de la temperatura:

$$\begin{aligned}
\text{for } T_{min,1} \leq T < T_{max,1} : c_p(T) &= A_1 + A_2 T + A T^3 + \dots \\
\text{for } T_{min,2} \leq T < T_{max,2} : c_p(T) &= A_1 + A_2 T + A T^3 + \dots
\end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

5. Densidad.

Se utiliza la ecuación de los gases ideales:

$$\rho = \frac{P_{op}}{\frac{R}{M_w} T} \quad (\text{A.23})$$

A.5. Modelado de la radiación

La ecuación general de la radiación es:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (\text{A.24})$$

Según el método de ordenadas discretas descrito en el apartado 2.1.3 obtenemos la ecuación:

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (\text{A.25})$$

A.6. Modelado de la difusión

Para modelar la difusión tenemos dos métodos distintos, el primero es utilizar la Ley de Fick:

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (\text{A.26})$$

donde, $D_{i,m}$ es el coeficiente de la difusión másica para la especie i en la mezcla y $D_{i,T}$ es el coeficiente de difusión térmica.

Y el segundo es utilizar la ecuación de Stefan-Maxwell:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{X_i X_j}{ij} (\vec{V}_j - \vec{V}_i) = \vec{d}_i - \frac{\nabla T}{T} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{X_i X_j}{ij} \left(\frac{D_{T,j}}{\rho_j} - \frac{D_{T,i}}{\rho_i} \right) \quad (\text{A.27})$$

Donde,

- X = fracción molar
- \vec{V} = velocidad de difusión
- ij = coeficiente de difusivo de la especie i en la especie j
- D_T = coeficiente de difusión térmica

Apéndice B

Mallas utilizadas

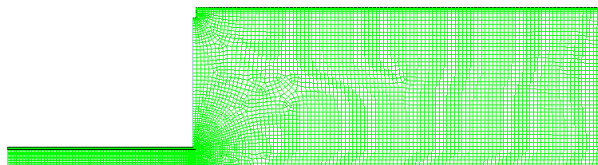


Figura B.1: Malla ortogonal estructurada

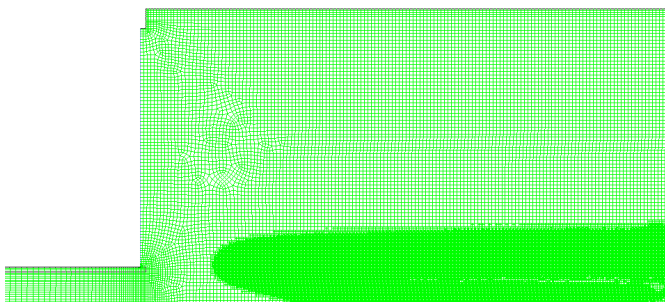


Figura B.2: Malla utilizando la opción de refinamiento

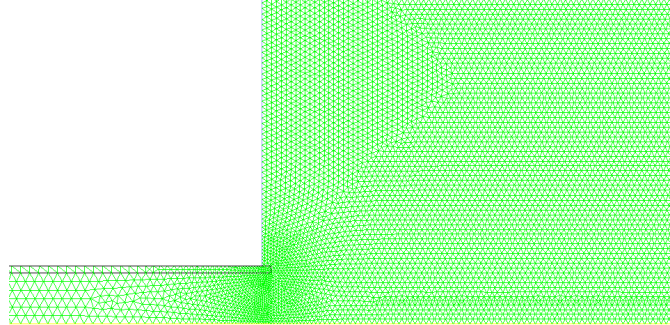


Figura B.3: Malla no estructurada de triángulos

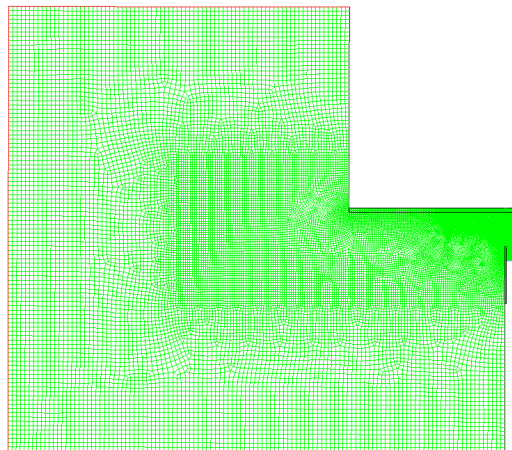


Figura B.4: Malla llama-pared 90°

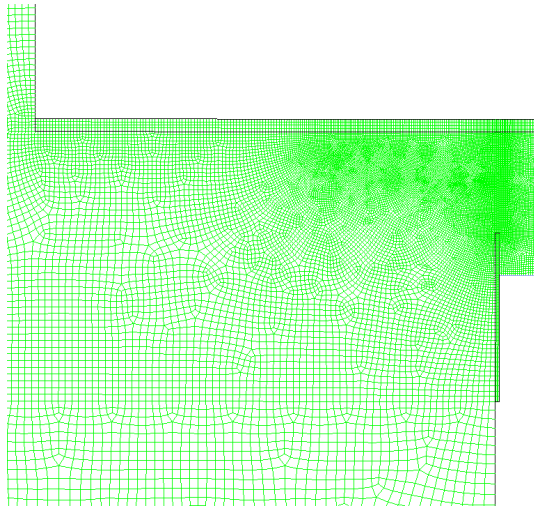


Figura B.5: Malla llama-pared 90° con zoom

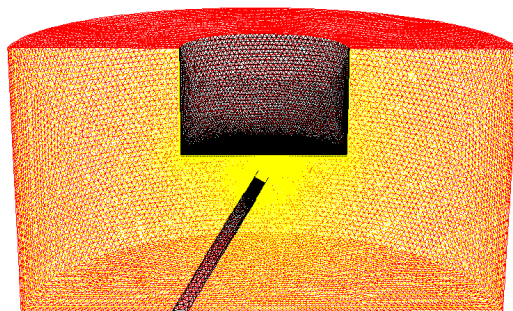


Figura B.6: Malla llama-pared 60°

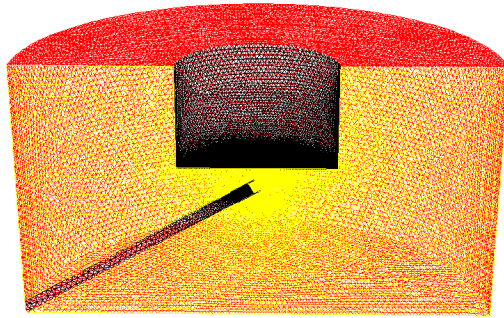


Figura B.7: Malla llama-pared 30°

Apéndice C

Mecanismos utilizados

C.1. Mecanismo de Smooke

No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{\left(-\frac{E_{act}}{RT}\right)}$		
			A	b	E_{act}
1	$H + O_2 \Rightarrow OH + O$	$k^f [H_2][O_2]$	2.000E+14	0	16800
2	$OH + O \Rightarrow H + O_2$	$k^f [OH][O]$	1.575E+13	0	690
3	$O + H_2 \Rightarrow OH + H$	$k^f [O][H_2]$	1.800E+10	1.00	8826.00
4	$OH + H \Rightarrow O + H_2$	$k^f [OH][H]$	8.000E+09	1.00	6760.00
5	$H_2 + OH \Rightarrow H_2O + H$	$k^f [H_2][OH]$	1.170E+09	1.30	3626.00
6	$H_2O + H \Rightarrow H_2 + OH$	$k^f [H_2O][H]$	5.090E+09	1.30	18588.00
7	$OH + OH \Rightarrow O + H_2O$	$k^f [OH][OH]$	6.000E+08	1.30	0.00
8	$O + H_2O \Rightarrow OH + OH$	$k^f [O][H_2O]$	5.900E+09	1.30	17029.00
9	$H + O_2 + M \Rightarrow HO_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [O][H_2O]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = CH_4/6,5, H_2O/6,5, CO_2/1,5, CO/0,75, O_2/0,4, N_2/0,4$	2.300E+18	-0.80	0.00
10	$H + HO_2 \Rightarrow OH + OH$	$k^f [H][HO_2]$	1.500E+14	0.00	1004.00
11	$H + HO_2 \Rightarrow H_2 + O_2$	$k^f [H][HO_2]$	2.500E+13	0.00	700.00
12	$OH + HO_2 \Rightarrow H_2O + O_2$	$k^f [OH][HO_2]$	2.000E+13	0.00	1000.00
13	$CO + OH \Rightarrow CO_2 + H$	$k^f [CO][OH]$	1.510E+07	1.30	-758.00
14	$CO_2 + H \Rightarrow CO + OH$	$k^f [CO_2][H]$	1.570E+09	1.30	22337.00
15	$CH_4(+M) \Rightarrow CH_3 + H(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [CH_4]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 6.300E+14 Low: 1.000E+17	0.00	104000.00 86000.00
16	$CH_3 + H(+M) \Rightarrow CH_4(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [CH_3][H]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 5.200E+12 Low: 8.254E14	0.00	-1310.00 -19310
17	$CH_4 + H \Rightarrow CH_3 + H_2$	$k^f [CH_4][H]$	2.200E+04	3.00	8750.00
18	$CH_3 + H_2 \Rightarrow CH_4 + H$	$k^f [CH_3][H_2]$	9.570E+02	3.00	8750.00
19	$CH_4 + OH \Rightarrow CH_3 + H_2O$	$k^f [CH_4][OH]$	1.600E+06	2.10	2460.00
20	$CH_3 + H_2O \Rightarrow CH_4 + OH$	$k^f [CH_3][H_2O]$	3.020E+05	2.10	17422.00
21	$CH_3 + O \Rightarrow CH_2O + H$	$k^f [CH_3][O]$	6.800E+13	0.00	0.00
22	$CH_2O + H \Rightarrow CHO + H_2$	$k^f [CH_2O][H]$	2.500E+13	0.00	3991.00
23	$CH_2O + OH \Rightarrow CHO + H_2O$	$k^f [CH_2O][OH]$	3.000E+13	0.00	1195.00
24	$CHO + H \Rightarrow CO + H_2$	$k^f [CHO][H]$	4.000E+13	0.00	0.00
25	$CHO + M \Rightarrow CO + H + M$	$k^f [CHO]$	1.600E+14	0.00	14700.00
26	$CH_3 + O_2 \Rightarrow CH_3O + O$	$k^f [CH_3][O_2]$	7.000E+12	0.00	25652.00

No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{(-\frac{E_{act}}{RT})}$		
			A	b	E_{act}
27	$CH_3O + H \Rightarrow CH_2O + H_2$	$k^f[CH_3O][H]$	2.000E+13	0.00	0.00
28	$CH_3O + M \Rightarrow CH_2O + H + M$	$k^f[CH_3O]$	2.400E+13	0.00	28812.00
29	$HO_2 + HO_2 \Rightarrow H_2O_2 + O_2$	$k^f[HO_2]$	2.000E+12	0.00	0.00
30	$H_2O_2 + M \Rightarrow OH + OH + M$	$k^f[H_2O_2]$	1.300E+17	0.00	45500.00
31	$OH + OH + M \Rightarrow H_2O_2 + M$	$k^f[OH][OH]$	9.860E+14	0.00	-5070.00
32	$H_2O_2 + OH \Rightarrow H_2O + HO_2$	$k^f[H_2O_2][OH]$	1.000E+13	0.00	1800.00
33	$H_2O + HO_2 \Rightarrow H_2O_2 + OH$	$k^f[H_2O][HO_2]$	2.860E+13	0.00	32790.00
34	$OH + H + M \Rightarrow H_2O + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f[OH][H]$	2.200E+22	-2.00	0.00
35	$H + H + M \Rightarrow H_2 + M$	for $\alpha/\beta_{\alpha} = CH_4/6,5, H_2O/6,5, CO_2/1,5, CO/0,75, O_2/0,4, N_2/0,4$	1.800E+18	-1.00	0.00
		$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f[H][H]$			
		for $\alpha/\beta_{\alpha} = CH_4/6,5, H_2O/6,5, CO_2/1,5, CO/0,75, O_2/0,4, N_2/0,4$			

Tabla C.1: Mecanismo de Smooke para CH_4 (Unidades: cm, s, mol, cal,K).

C.2. Mecanismo Drm19

No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{\left(-\frac{E_{act}}{RT}\right)}$		
			A	b	E_{act}
1	$O + H + M \Rightarrow OH + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [O][H]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/2,0, H_2O/6,0, CH_4/2,0, CO/1,5, CO_2/2,0, C_2H_6/3,0, Ar/0,7$	5.000E+17	-1.00	0.00
2	$O + H_2 \Rightarrow H + OH$	$k^f [O][H_2]$	5.000E+04	2.67	6290.00
3	$O + HO_2 \Rightarrow OH + O_2$	$k^f [O][HO_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
4	$O + CH_2 \Rightarrow H + HCO$	$k^f [O][CH_2]$	8.000E+13	0.00	0.00
5	$O + CH_2(s) \Rightarrow H + HCO$	$k^f [O]$	1.500E+13	0.00	0.00
6	$O + CH_3 \Rightarrow H + CH_2O$	$k^f [O][CH_3]$	8.430E+13	0.00	0.00
7	$O + CH_4 \Rightarrow OH + CH_3$	$k^f [O][CH_4]$	1.020E+09	1.50	8600.00
8	$O + CO + M \Rightarrow CO_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [O][CO]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/2,0, H_2O/6,0, CH_4/2,0, CO/1,5, CO_2/3,5, C_2H_6/3,0, Ar/0,5$	6.020E+14	0.00	3000.00
9	$O + HCO \Rightarrow OH + CO$	$k^f [O][HCO]$	3.000E+13	0.00	0.00
10	$O + HCO \Rightarrow H + CO_2$	$k^f [O][HCO]$	3.000E+13	0.00	0.00
11	$O + CH_2O \Rightarrow OH + HCO$	$k^f [O][CH_2O]$	3.900E+13	0.00	3540.00
12	$O + C_2H_4 \Rightarrow CH_3 + HCO$	$k^f [O][C_2H_4]$	1.920E+07	1.83	220.00
13	$O + C_2H_5 \Rightarrow CH_3 + CH_2O$	$k^f [O][C_2H_5]$	1.320E+14	0.00	0.00
14	$O + C_2H_6 \Rightarrow OH + C_2H_5$	$k^f [O][C_2H_6]$	8.980E+07	1.92	5690.00
15	$O_2 + CO \Rightarrow O + CO_2$	$k^f [O_2][CO]$	2.500E+12	0.00	47800.00
16	$O_2 + CH_2O \Rightarrow HO_2 + HCO$	$k^f [O_2][CH_2O]$	1.000E+14	0.00	40000.00
17	$H + O_2 + M \Rightarrow HO_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [H][O_2]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = O_2/0,0, H_2O/0,0, CO/0,75, CO_2/1,5, C_2H_6/1,5, N_2/0,0, Ar/0,0$	2.800E+18	-0.86	0.00
18	$H + 2O_2 \Rightarrow HO_2 + O_2$	$k^f [H][O_2]^2$	3.000E+20	-1.72	0.00
19	$H + O_2 + H_2O \Rightarrow HO_2 + H_2O$	$k^f [H][O_2][H_2O]$	9.380E+18	-0.76	0.00
20	$H + O_2 + N_2 \Rightarrow HO_2 + N_2$	$k^f [H][O_2][N_2]$	3.750E+20	-1.72	0.00
21	$H + O_2 + Ar \Rightarrow HO_2 + Ar$	$k^f [H][O_2][Ar]$	7.000E+17	-0.80	0.00
22	$H + O_2 \Rightarrow O + OH$	$k^f [H][O_2]$	8.300E+13	0.00	14413.00
23	$2H + M \Rightarrow H_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [H]^2$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/0,0, H_2O/0,0, CH_4/2,0, CO_2/0,0, C_2H_6/3,0, Ar/0,63$	1.000E+18	-1.00	0.00
24	$2H + H_2 \Rightarrow 2H_2$	$k^f [H]^2 [H_2]$	9.000E+16	-0.60	0.00
25	$2H + H_2O \Rightarrow H_2 + H_2O$	$k^f [H]^2 [H_2O]$	6.000E+19	-1.25	0.00
26	$2H + CO_2 \Rightarrow H_2 + CO_2$	$k^f [H]^2 [CO_2]$	5.500E+19	-2.00	0.00
27	$H + OH + M \Rightarrow H_2O + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [H][OH]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/0,73, H_2O/3,65, CH_4/2,0, C_2H_6/3,0, Ar/0,38$	2.200E+22	-2.00	0.00
28	$H + HO_2 \Rightarrow H_2 + O_2$	$k^f [H][HO_2]$	2.800E+13	0.00	1068.00
29	$H + HO_2 \Rightarrow 2OH$	$k^f [H][HO_2]$	1.340E+14	0.00	635.00
30	$H + CH_2(+M) \Rightarrow CH_3(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][CH_2]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 2.500E+16 Low: 3.200E+27	-0.80 -3.14	0.00 1230.00
31	$H + CH_3(+M) \Rightarrow CH_4(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][CH_3]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 1.270E+16 Low: 2.477E+33	-0.63 -4.76	383.00 2440.00
32	$H + CH_4 \Rightarrow CH_3 + H_2$	$k^f [H][CH_4]$	6.600E+08	1.62	10840.00
33	$H + HCO(+M) \Rightarrow CH_2O(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][HCO]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 1.090E+12 Low: 1.3500E+24	0.48 -2.57	-260.00 1425.00
34	$H + HCO \Rightarrow H_2 + CO$	$k^f [H][HCO]$	7.340E+13	0.00	0.00
35	$H + CH_2O(+M) \Rightarrow CH_3O(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][CH_2O]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 5.400E+11 Low: 2.2000E+30	0.454 -4.80	2600.00 5560.00
36	$H + CH_2O \Rightarrow HCO + H_2$	$k^f [H][CH_2O]$	2.300E+10	1.05	3275.00
37	$H + CH_3O \Rightarrow OH + CH_3$	$k^f [H][CH_2O]$	3.200E+13	0.00	0.00
38	$H + C_2H_4(+M) \Rightarrow C_2H_5(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][C_2H_4]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 1.080E+12 Low: 1.200E+42	0.454 -7.62	1820.00 6970.00
39	$H + C_2H_5(+M) \Rightarrow C_2H_6(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][C_2H_5]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 5.210E+17 Low: 1.990E+41	-0.99 -7.08	1580.00 6685.00
40	$H + C_2H_6 \Rightarrow H_2 + C_2H_5$	$k^f [H][C_2H_6]$	1.150E+08	1.90	7530.00
41	$H_2 + CO(+M) \Rightarrow CH_2O(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H_2][CO]$	High: 4.300E+07	1.50	79600.00

No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{(-\frac{E_{act}}{RT})}$		
			A	b	E_{act}
		$\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	Low: 5.070E+27	-3.42	84350.00
42	$OH + H_2 \Rightarrow H + H_2O$	$k^f[OH][H_2]$	2.160E+08	1.51	3430.00
43	$2OH \Rightarrow O + H_2O$	$k^f[OH]^2$	3.270E+04	2.40	-2110.00
44	$OH + HO_2 \Rightarrow O_2 + H_2O$	$k^f[OH][HO_2]$	2.900E+13	0.00	-500.00
45	$OH + CH_2 \Rightarrow H + CH_2O$	$k^f[OH][CH_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
46	$OH + CH_2(s) \Rightarrow H + CH_2O$	$k^f[OH]$	3.000E+13	0.00	0.00
47	$OH + CH_3 \Rightarrow CH_2 + H_2O$	$k^f[OH][CH_3]$	5.600E+07	1.60	5420.00
48	$OH + CH_3 \Rightarrow CH_2(s) + H_2O$	$k^f[OH][CH_3]$	2.501E+13	0.00	0.00
49	$OH + CH_4 \Rightarrow CH_3 + H_2O$	$k^f[OH][CH_4]$	1.000E+08	1.60	3120.00
50	$OH + CO \Rightarrow H + CO_2$	$k^f[OH][CO]$	4.760E+07	1.228	70.00
51	$OH + HCO \Rightarrow H_2O + CO$	$k^f[OH][HCO]$	5.000E+13	0.00	0.00
52	$OH + CH_2O \Rightarrow HCO + H_2O$	$k^f[OH][CH_2O]$	3.430E+09	1.18	-447.00
53	$OH + C_2H_6 \Rightarrow C_2H_5 + H_2O$	$k^f[OH][C_2H_6]$	3.540E+06	2.12	870.00
54	$HO_2 + CH_2 \Rightarrow OH + CH_2O$	$k^f[HO_2][CH_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
55	$HO_2 + CH_3 \Rightarrow O_2 + CH_4$	$k^f[HO_2][CH_3]$	1.000E+12	0.00	0.00
56	$HO_2 + CH_3 \Rightarrow OH + CH_3O$	$k^f[HO_2][CH_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
57	$HO_2 + CO \Rightarrow OH + CO_2$	$k^f[HO_2][CO]$	1.500E+14	0.00	23600.00
58	$CH_2 + O_2 \Rightarrow OH + HCO$	$k^f[CH_2][O_2]$	1.320E+13	0.00	1500.00
59	$CH_2 + H_2 \Rightarrow H + CH_3$	$k^f[CH_2][H_2]$	5.000E+05	2.00	7230.00
60	$CH_2 + CH_3 \Rightarrow H + C_2H_4$	$k^f[CH_2][CH_3]$	4.000E+13	0.00	0.00
61	$CH_2 + CH_4 \Rightarrow 2CH_3$	$k^f[CH_2][CH_4]$	2.460E+06	2.00	8270.00
62	$CH_2(s) + N_2 \Rightarrow CH_2 + N_2$	$k^f[N_2]$	1.500E+13	0.00	600.00
63	$CH_2(s) + Ar \Rightarrow CH_2 + Ar$	$k^f[Ar]$	9.000E+12	0.00	600.00
64	$CH_2(s) + O_2 \Rightarrow H + OH + CO$	$k^f[O_2]$	2.800E+13	0.00	600.00
65	$CH_2(s) + O_2 \Rightarrow CO + H_2O$	$k^f[O_2]$	1.200E+13	0.00	600.00
66	$CH_2(s) + H_2 \Rightarrow CH_3 + H$	$k^f[H_2]$	7.000E+13	0.00	0.00
67	$CH_2(s) + H_2O \Rightarrow CH_2 + H_2O$	$k^f[H_2O]$	3.000E+13	0.00	600.00
68	$CH_2(s) + CH_3 \Rightarrow H + C_2H_4$	$k^f[CH_3]$	1.200E+13	0.00	-570.00
69	$CH_2(s) + CH_4 \Rightarrow CH_3$	$k^f[CH_4]$	1.600E+13	0.00	-570.00
70	$CH_2(s) + CO \Rightarrow CH_2 + CO$	$k^f[CO]$	9.000E+12	0.00	0.00
71	$CH_2(s) + CO_2 \Rightarrow CH_2 + CO_2$	$k^f[CO_2]$	7.000E+12	0.00	0.00
72	$CH_2(s) + CO_2 \Rightarrow CH_2O + CO$	$k^f[CO_2]$	1.400E+13	0.00	0.00
73	$CH_3 + O_2 \Rightarrow O + CH_3O$	$k^f[CH_3][O_2]$	2.675E+13	0.00	28800.00
74	$CH_3 + O_2 \Rightarrow OH + CH_2O$	$k^f[CH_3][O_2]$	3.600E+10	0.00	8940.00
75	$2CH_3(+M) \Rightarrow C_2H_6(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [CH_3]^2$	High: 2.120E+16	-0.97	620.00
		$\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	Low: 1.770E+50	-9.67	6220.00
76	$2CH_3 \Rightarrow H + C_2H_5$	$k^f[CH_3]^2$	4.990E+12	0.10	10600.00
77	$CH_3 + HCO \Rightarrow CO + CH_4$	$k^f[CH_3][HCO]$	2.648E+13	0.00	0.00
78	$CH_3 + CH_2O \Rightarrow HCO + CH_4$	$k^f[CH_3][CH_2O]$	3.320E+03	2.81	5860.00
79	$CH_3 + C_2H_6 \Rightarrow C_2H_5 + CH_4$	$k^f[CH_3][C_2H_6]$	6.140E+06	1.74	10450.00
80	$HCO + H_2O \Rightarrow H + CO + H_2O$	$k^f[HCO][H_2O]$	2.244E+18	-1.00	17000.00
81	$HCO + M \Rightarrow H + CO + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f[HCO]$	1.870E+17	-1.00	17000.00
		for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/2,00, H_2O/0,00, CH_4/2,0, C_2H_6/3,0, CO_2/2,00, CO/1,5$			
82	$HCO + O_2 \Rightarrow HO_2 + CO$	$k^f[HCO][O_2]$	7.600E+12	0.00	400.00
83	$CH_3O + O_2 \Rightarrow HO_2 + CH_2O$	$k^f[CH_3O][O_2]$	4.280E-13	7.60	-3530.00
84	$C_2H_5 + O_2 \Rightarrow HO_2 + C_2H_4$	$k^f[C_2H_5][O_2]$	8.400E+11	0.00	3875.00

Tabla C.2: Mecanismo Drm19 para CH_4 (Unidades: cm, s, mol, cal,K).

C.3. Mecanismo Drm22

No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{\left(-\frac{E_{act}}{RT}\right)}$		
			A	b	E_{act}
1	$O + H + M \Rightarrow OH + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [O][H]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/2,0, H_2O/6,0, CH_4/2,0, CO/1,5, CO_2/2,0, C_2H_6/3,0, Ar/0,7$	5.000E+17	-1.00	0.00
2	$O + H_2 \Rightarrow H + OH$	$k^f [O][H_2]$	5.000E+04	2.67	6290.00
3	$O + HO_2 \Rightarrow OH + O_2$	$k^f [O][HO_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
4	$O + CH_2 \Rightarrow H + HCO$	$k^f [O][CH_2]$	8.000E+13	0.00	0.00
5	$O + CH_2(s) \Rightarrow H + HCO$	$k^f [O]$	1.500E+13	0.00	0.00
6	$O + CH_3 \Rightarrow H + CH_2O$	$k^f [O][CH_3]$	8.430E+13	0.00	0.00
7	$O + CH_4 \Rightarrow OH + CH_3$	$k^f [O][CH_4]$	1.020E+09	1.50	8600.00
8	$O + CO + M \Rightarrow CO_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [O][CO]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/2,0, H_2O/6,0, CH_4/2,0, CO/1,5, CO_2/3,5, C_2H_6/3,0, Ar/0,5$	6.020E+14	0.00	3000.00
9	$O + HCO \Rightarrow OH + CO$	$k^f [O][HCO]$	3.000E+13	0.00	0.00
10	$O + HCO \Rightarrow H + CO_2$	$k^f [O][HCO]$	3.000E+13	0.00	0.00
11	$O + CH_2O \Rightarrow OH + HCO$	$k^f [O][CH_2O]$	3.900E+13	0.00	3540.00
12	$O + C_2H_2 \Rightarrow CH_2(s) + CO$	$k^f [O][C_2H_2]$	1.020E+07	2.00	1900.00
13	$O + C_2H_2 \Rightarrow CH_2 + CO$	$k^f [O][C_2H_2]$	1.020E+07	2.00	1900.00
14	$O + C_2H_4 \Rightarrow CH_3 + HCO$	$k^f [O][C_2H_4]$	1.920E+07	1.83	220.00
15	$O + C_2H_5 \Rightarrow CH_3 + CH_2O$	$k^f [O][C_2H_5]$	1.320E+14	0.00	0.00
16	$O + C_2H_6 \Rightarrow OH + C_2H_5$	$k^f [O][C_2H_6]$	8.980E+07	1.92	5690.00
17	$O_2 + CO \Rightarrow O + CO_2$	$k^f [O_2][CO]$	2.500E+12	0.00	47800.00
18	$O_2 + CH_2O \Rightarrow HO_2 + HCO$	$k^f [O_2][CH_2O]$	1.000E+14	0.00	40000.00
19	$H + O_2 + M \Rightarrow HO_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [H][O_2]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = O_2/0,0, H_2O/0,0, CO/0,75, CO_2/1,5, C_2H_6/1,5, N_2/0,0, Ar/0,0$	2.800E+18	-0.86	0.00
20	$H + 2O_2 \Rightarrow HO_2 + O_2$	$k^f [H][O_2]^2$	3.000E+20	-1.72	0.00
21	$H + O_2 + H_2O \Rightarrow HO_2 + H_2O$	$k^f [H][O_2][H_2O]$	9.380E+18	-0.76	0.00
22	$H + O_2 + N_2 \Rightarrow HO_2 + N_2$	$k^f [H][O_2][N_2]$	3.750E+20	-1.72	0.00
23	$H + O_2 + Ar \Rightarrow HO_2 + Ar$	$k^f [H][O_2][Ar]$	7.000E+17	-0.80	0.00
24	$H + O_2 \Rightarrow O + OH$	$k^f [H][O_2]$	8.300E+13	0.00	14413.00
25	$2H + M \Rightarrow H_2 + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [H]^2$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/0,0, H_2O/0,0, CH_4/2,0, CO_2/0,0, C_2H_6/3,0, Ar/0,63$	1.000E+18	-1.00	0.00
26	$2H + H_2 \Rightarrow 2H_2$	$k^f [H]^2 [H_2]$	9.000E+16	-0.60	0.00
27	$2H + H_2O \Rightarrow H_2 + H_2O$	$k^f [H]^2 [H_2O]$	6.000E+19	-1.25	0.00
28	$2H + CO_2 \Rightarrow H_2 + CO_2$	$k^f [H]^2 [CO_2]$	5.500E+19	-2.00	0.00
29	$H + OH + M \Rightarrow H_2O + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f [H][OH]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/0,73, H_2O/3,65, CH_4/2,0, C_2H_6/3,0, Ar/0,38$	2.200E+22	-2.00	0.00
30	$H + HO_2 \Rightarrow H_2 + O_2$	$k^f [H][HO_2]$	2.800E+13	0.00	1068.00
31	$H + HO_2 \Rightarrow 2OH$	$k^f [H][HO_2]$	1.340E+14	0.00	635.00
32	$H + H_2O_2 \Rightarrow HO_2 + H_2$	$k^f [H][H_2O_2]$	1.210E+07	2.00	5200.00
33	$H + CH_2(+M) \Rightarrow CH_3(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][CH_2]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 2.500E+16 Low: 3.200E+27	-0.80 -3.14	0.00 1230.00
34	$H + CH_3(+M) \Rightarrow CH_4(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][CH_3]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 1.270E+16 Low: 2.477E+33	-0.63 -4.76	383.00 2440.00
35	$H + CH_4 \Rightarrow CH_3 + H_2$	$k^f [H][CH_4]$	6.600E+08	1.62	10840.00
36	$H + HCO(+M) \Rightarrow CH_2O(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][HCO]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 1.090E+12 Low: 1.3500E+24	0.48 -2.57	-260.00 1425.00
37	$H + HCO \Rightarrow H_2 + CO$	$k^f [H][HCO]$	7.340E+13	0.00	0.00
38	$H + CH_2O(+M) \Rightarrow CH_3O(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][CH_2O]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 5.400E+11 Low: 2.2000E+30	0.454 -4.80	2600.00 5560.00
39	$H + CH_2O \Rightarrow HCO + H_2$	$k^f [H][CH_2O]$	2.300E+10	1.05	3275.00
40	$H + CH_3O \Rightarrow OH + CH_3$	$k^f [H][CH_2O]$	3.200E+13	0.00	0.00
41	$H + C_2H_2(+M) \Rightarrow C_2H_3(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][C_2H_2]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 5.600E+12 Low: 3.8000E+40	0.00 -7.27	2400.00 7220.00
42	$H + C_2H_3(+M) \Rightarrow C_2H_4(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][C_2H_3]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 6.080E+12 Low: 1.400E+30	0.27 -3.86	280.00 3320.00

No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{(-\frac{E_{act}}{RT})}$		
			A	b	E_{act}
43	$H + C_2H_3 \Rightarrow H_2 + C_2H_2$	$k^f[H][C_2H_3]$	3.000E+13	0.00	0.00
44	$H + C_2H_4(+M) \Rightarrow C_2H_5(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][C_2H_4]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 1.080E+12 Low: 1.200E+42	0.454 -7.62	1820.00 6970.00
45	$H + C_2H_4 \Rightarrow H_2 + C_2H_3$	$k^f[H][C_2H_4]$	1.325E+06	2.53	12240.00
46	$H + C_2H_5(+M) \Rightarrow C_2H_6(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H][C_2H_5]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 5.210E+17 Low: 1.990E+41	-0.99 -7.08	1580.00 6685.00
47	$H + C_2H_6 \Rightarrow H_2 + C_2H_5$	$k^f[H][C_2H_6]$	1.150E+08	1.90	7530.00
48	$H_2 + CO(+M) \Rightarrow CH_2O(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [H_2][CO]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 4.300E+07 Low: 5.070E+27	1.50 -3.42	79600.00 84350.00
49	$OH + H_2 \Rightarrow H + H_2O$	$k^f[OH][H_2]$	2.160E+08	1.51	3430.00
50	$2OH(+M) \Rightarrow H_2O_2(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [OH]^2$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 7.400E+13 Low: 2.300E+18	-0.37 -0.90	0.00 -1700.00
51	$2OH \Rightarrow O + H_2O$	$k^f[OH]^2$	3.270E+04	2.40	-2110.00
52	$OH + HO_2 \Rightarrow O_2 + H_2O$	$k^f[OH][HO_2]$	2.900E+13	0.00	-500.00
53	$OH + H_2O_2 \Rightarrow HO_2 + H_2O$	$k^f[OH][H_2O_2]$	5.800E+14	0.00	9560.00
54	$OH + CH_2 \Rightarrow H + CH_2O$	$k^f[OH][CH_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
55	$OH + CH_2(s) \Rightarrow H + CH_2O$	$k^f[OH]$	3.000E+13	0.00	0.00
56	$OH + CH_3 \Rightarrow CH_2 + H_2O$	$k^f[OH][CH_3]$	5.600E+07	1.60	5420.00
57	$OH + CH_3 \Rightarrow CH_2(s) + H_2O$	$k^f[OH][CH_3]$	2.501E+13	0.00	0.00
58	$OH + CH_4 \Rightarrow CH_3 + H_2O$	$k^f[OH][CH_4]$	1.000E+08	1.60	3120.00
59	$OH + CO \Rightarrow H + CO_2$	$k^f[OH][CO]$	4.760E+07	1.228	70.00
60	$OH + HCO \Rightarrow H_2O + CO$	$k^f[OH][HCO]$	5.000E+13	0.00	0.00
61	$OH + CH_2O \Rightarrow HCO + H_2O$	$k^f[OH][CH_2O]$	3.430E+09	1.18	-447.00
62	$OH + C_2H_2 \Rightarrow CH_3 + CO$	$k^f[OH][C_2H_2]$	4.830E-04	4.00	-2000.00
63	$OH + C_2H_3 \Rightarrow C_2H_2 + H_2O$	$k^f[OH][C_2H_3]$	5.000E+12	0.00	0.00
64	$OH + C_2H_4 \Rightarrow C_2H_3 + H_2O$	$k^f[OH][C_2H_4]$	3.600E+06	2.00	2500.00
65	$OH + C_2H_6 \Rightarrow C_2H_5 + H_2O$	$k^f[OH][C_2H_6]$	3.540E+06	2.12	870.00
66	$2HO_2 \Rightarrow O_2 + H_2O_2$	$k^f[HO_2]^2$	1.300E+11	0.00	-1630.00
67	$2HO_2 \Rightarrow O_2 + H_2O_2$	$k^f[HO_2]^2$	4.200E+14	0.00	12000.00
68	$HO_2 + CH_2 \Rightarrow OH + CH_2O$	$k^f[HO_2][CH_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
69	$HO_2 + CH_3 \Rightarrow O_2 + CH_4$	$k^f[HO_2][CH_3]$	1.000E+12	0.00	0.00
70	$HO_2 + CH_3 \Rightarrow OH + CH_3O$	$k^f[HO_2][CH_2]$	2.000E+13	0.00	0.00
71	$HO_2 + CO \Rightarrow OH + CO_2$	$k^f[HO_2][CO]$	1.500E+14	0.00	23600.00
72	$HO_2 + CH_2O \Rightarrow HCO + H_2O_2$	$k^f[HO_2][CH_2O]$	1.000E+12	0.00	8000.00
73	$CH_2 + O_2 \Rightarrow OH + HCO$	$k^f[CH_2][O_2]$	1.320E+13	0.00	1500.00
74	$CH_2 + H_2 \Rightarrow H + CH_3$	$k^f[CH_2][H_2]$	5.000E+05	2.00	7230.00
75	$CH_2 + H_2 \Rightarrow H + CH_3$	$k^f[CH_2][H_2]$	5.000E+05	2.00	7230.00
76	$2CH_2 \Rightarrow H_2 + C_2H_2$	$k^f[CH_2]^2$	2.200E+13	0.00	0.00
77	$CH_2 + CH_3 \Rightarrow H + C_2H_4$	$k^f[CH_2][CH_3]$	4.000E+13	0.00	0.00
78	$CH_2 + CH_4 \Rightarrow 2CH_3$	$k^f[CH_2][CH_4]$	2.460E+06	2.00	8270.00
79	$CH_2(s) + N_2 \Rightarrow CH_2 + N_2$	$k^f[N_2]$	1.500E+13	0.00	600.00
80	$CH_2(s) + Ar \Rightarrow CH_2 + Ar$	$k^f[Ar]$	9.000E+12	0.00	600.00
81	$CH_2(s) + O_2 \Rightarrow H + OH + CO$	$k^f[O_2]$	2.800E+13	0.00	600.00
82	$CH_2(s) + O_2 \Rightarrow CO + H_2O$	$k^f[O_2]$	1.200E+13	0.00	600.00
83	$CH_2(s) + H_2 \Rightarrow CH_3 + H$	$k^f[H_2]$	7.000E+13	0.00	0.00
84	$CH_2(s) + H_2O \Rightarrow CH_2 + H_2O$	$k^f[H_2O]$	3.000E+13	0.00	600.00
85	$CH_2(s) + CH_3 \Rightarrow H + C_2H_4$	$k^f[CH_3]$	1.200E+13	0.00	-570.00
86	$CH_2(s) + CH_4 \Rightarrow CH_3$	$k^f[CH_4]$	1.600E+13	0.00	-570.00
87	$CH_2(s) + CO \Rightarrow CH_2 + CO$	$k^f[CO]$	9.000E+12	0.00	0.00
88	$CH_2(s) + CO_2 \Rightarrow CH_2 + CO_2$	$k^f[CO_2]$	7.000E+12	0.00	0.00
89	$CH_2(s) + CO_2 \Rightarrow CH_2O + CO$	$k^f[CO_2]$	1.400E+13	0.00	0.00
90	$CH_3 + O_2 \Rightarrow O + CH_3O$	$k^f[CH_3][O_2]$	2.675E+13	0.00	28800.00
91	$CH_3 + O_2 \Rightarrow OH + CH_2O$	$k^f[CH_3][O_2]$	3.600E+10	0.00	8940.00
92	$2CH_3(+M) \Rightarrow C_2H_6(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [CH_3]^2$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 2.120E+16 Low: 1.770E+50	-0.97 -9.67	620.00 6220.00
93	$2CH_3 \Rightarrow H + C_2H_5$	$k^f[CH_3]^2$	4.990E+12	0.10	10600.00

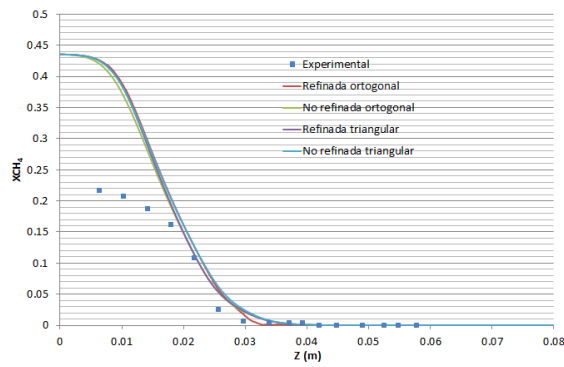
No.	Reaction	r^f	$k^f = AT^b e^{-\frac{E_{act}}{RT}}$		
			A	b	E_{act}
94	$CH_3 + HCO \Rightarrow CO + CH_4$	$k^f[CH_3][HCO]$	2.648E+13	0.00	0.00
95	$CH_3 + CH_2O \Rightarrow HCO + CH_4$	$k^f[CH_3][CH_2O]$	3.320E+03	2.81	5860.00
96	$CH_3 + C_2H_4 \Rightarrow C_2H_3 + CH_4$	$k^f[CH_3][C_2H_4]$	2.270E+05	2.00	9200.00
97	$CH_3 + C_2H_6 \Rightarrow C_2H_5 + CH_4$	$k^f[CH_3][C_2H_6]$	6.140E+06	1.74	10450.00
98	$HCO + H_2O \Rightarrow H + CO + H_2O$	$k^f[HCO][H_2O]$	2.244E+18	-1.00	17000.00
99	$HCO + M \Rightarrow H + CO + M$	$(\sum_{\alpha} \beta_{\alpha} x_{\alpha}) k^f[HCO]$ for $\alpha/\beta_{\alpha} = H_2/2,00, H_2O/0,00, CH_4/2,0, C_2H_6/3,0, CO_2/2,00, CO/1,5$	1.870E+17	-1.00	17000.00
100	$HCO + O_2 \Rightarrow HO_2 + CO$	$k^f[HCO][O_2]$	7.600E+12	0.00	400.00
101	$CH_3O + O_2 \Rightarrow HO_2 + CH_2O$	$k^f[CH_3O][O_2]$	4.280E-13	7.60	-3530.00
102	$C_2H_3 + O_2 \Rightarrow HCO + CH_2O$	$k^f[C_2H_3][O_2]$	3.980E+12	0.00	-240.00
103	$C_2H_4(+M) \Rightarrow H_2 + C_2H_2(+M)$	$k_{high} \left(\frac{P_r}{1+P_r} \right) [C_2H_4]$ $\hookrightarrow P_r = \frac{k_{low}[M]}{k_{high}}$	High: 8.000E+12 Low: 7.000E+50	0.44 -9.31	88770.00 99860.00
104	$C_2H_5 + O_2 \Rightarrow HO_2 + C_2H_4$	$k^f[C_2H_5][O_2]$	8.400E+11	0.00	3875.00

Tabla C.3: Mecanismo Drm22 para CH_4 (Unidades: cm, s, mol, cal,K).

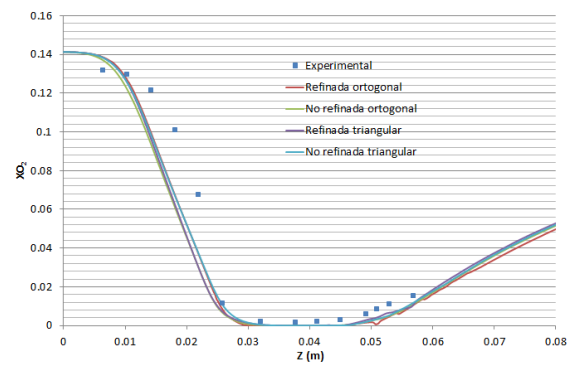
Apéndice D

Gráficos llama laminar

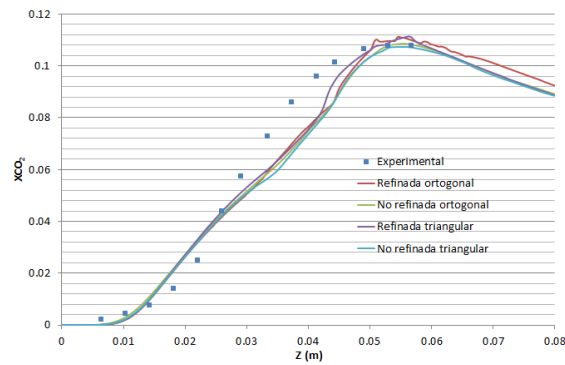
D.1. Estudio de la influencia de la malla



(a) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = 6,2$



(b) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = 6,2$

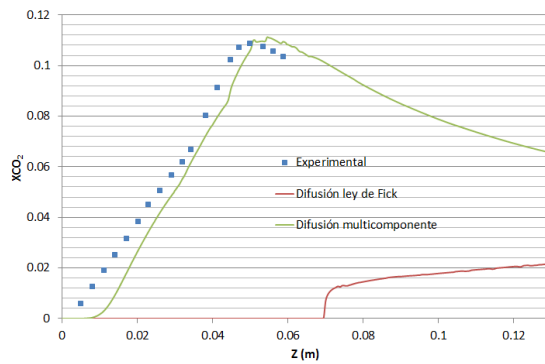


(c) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = 6,2$

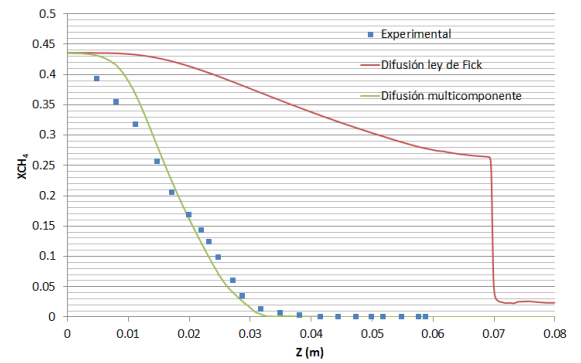
Figura D.1: Gráficas realizadas para el estudio de la influencia de la malla

D.2. Estudio del modelo difusivo

D.2.1. $\phi = 6,2$



(a) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = 6,2$



(b) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = 6,2$

Figura D.2: Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del modelo difusivo para $\phi = 6,2$

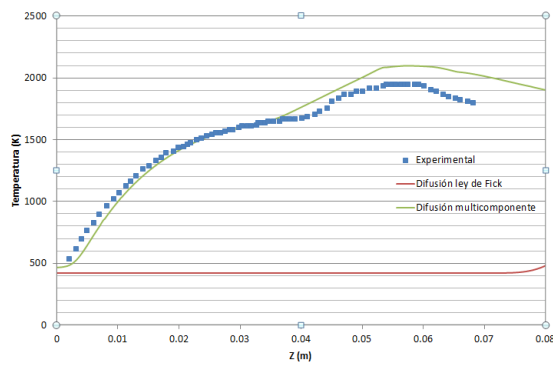
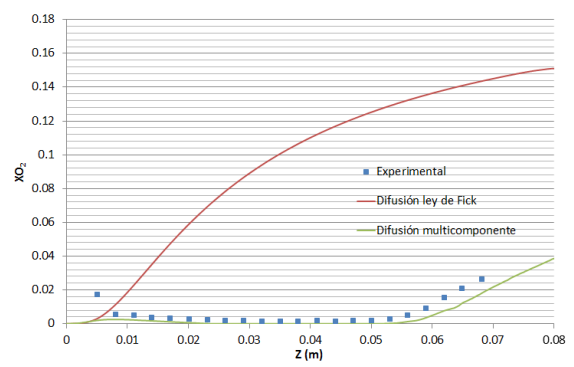
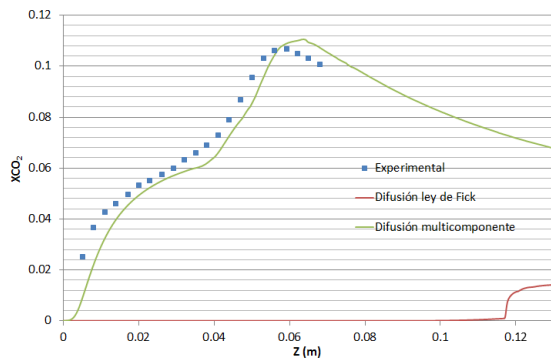
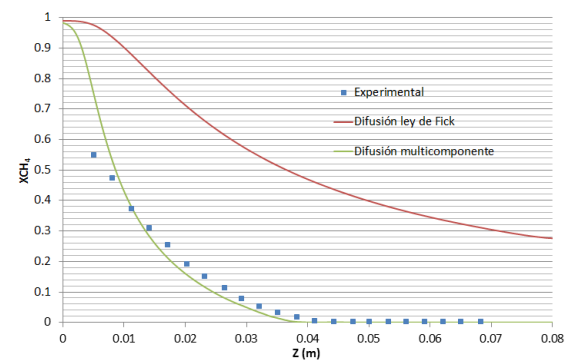
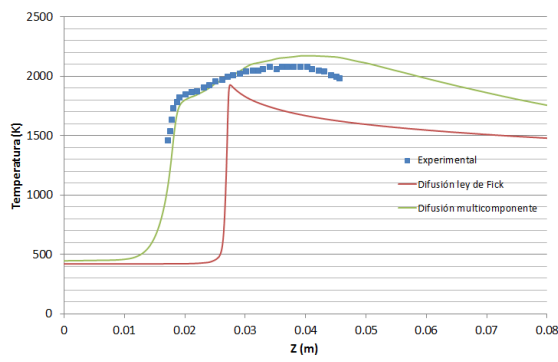
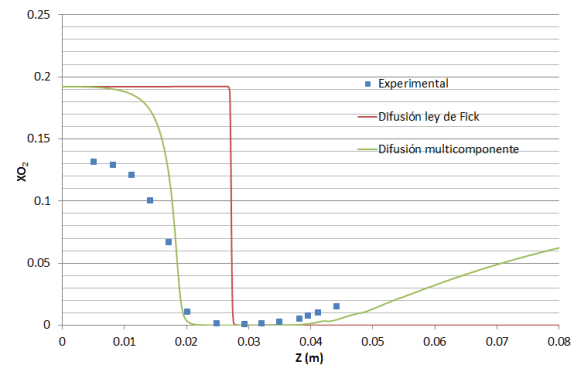
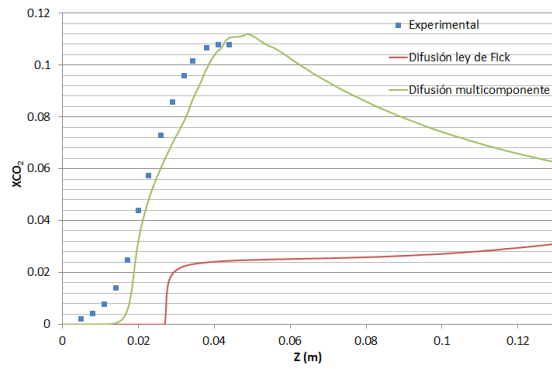
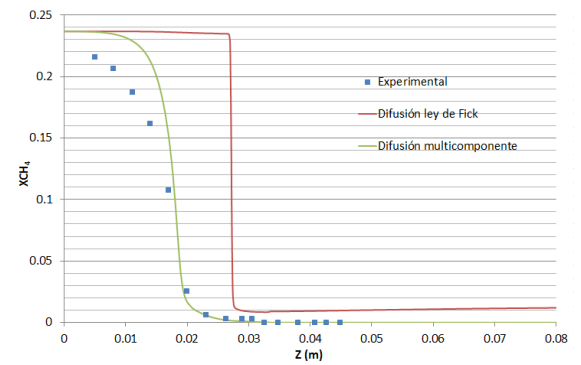
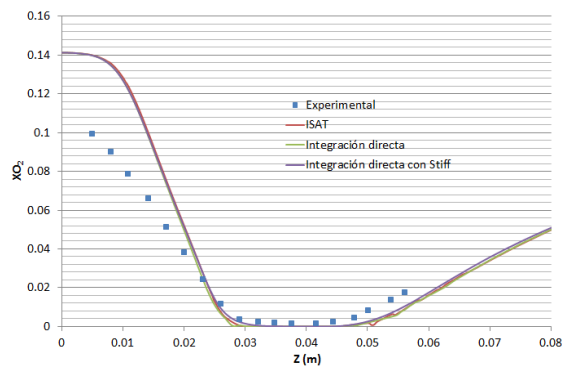
D.2.2. $\phi = \infty$ (a) Perfil de temperatura para $\phi = \infty$ (b) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = \infty$ (c) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = \infty$ (d) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = \infty$

Figura D.3: Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del modelo difusivo para $\phi = \infty$

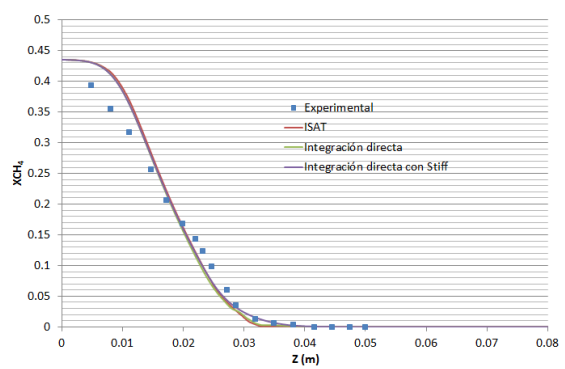
D.2.3. $\phi = 2,5$ (a) Perfil de temperatura para $\phi = 2,5$ (b) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = 2,5$ (c) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = 2,5$ (d) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = 2,5$ Figura D.4: Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del modelo difusivo para $\phi = 2,5$

D.3. Influencia del método de resolución de la cinética química

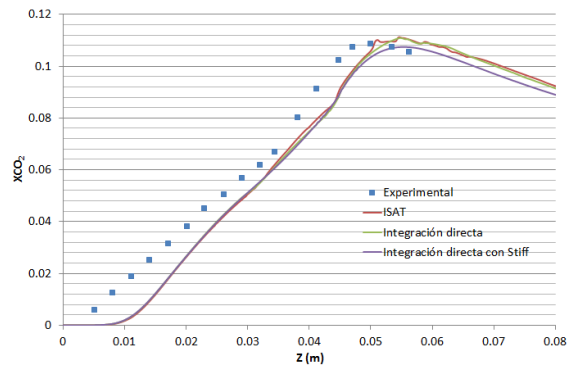
D.3.1. $\phi = 6,2$



(a) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = 6,2$



(b) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = 6,2$



(c) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = 6,2$

Figura D.5: Graficas realizadas para el estudio de la influencia del método de resolución de la cinética química para $\phi = 6,2$

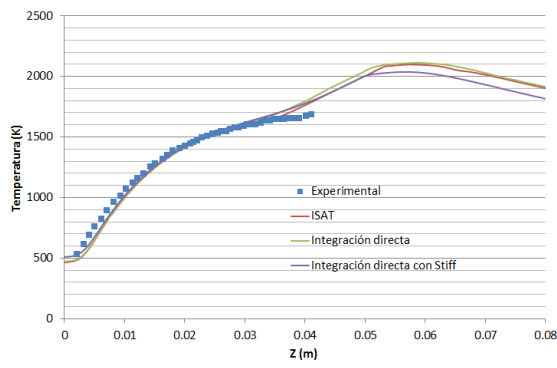
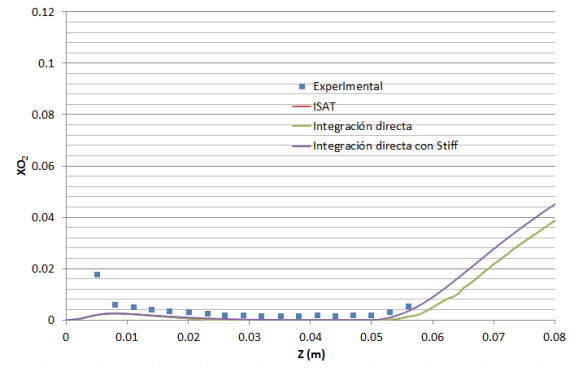
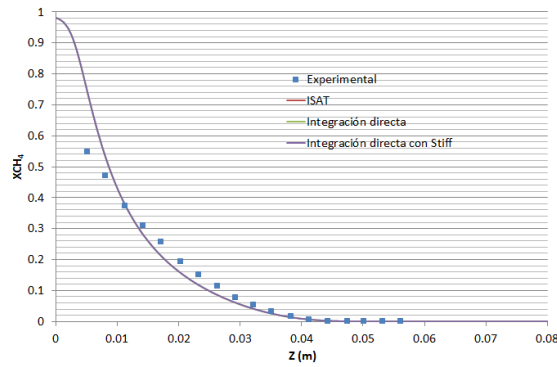
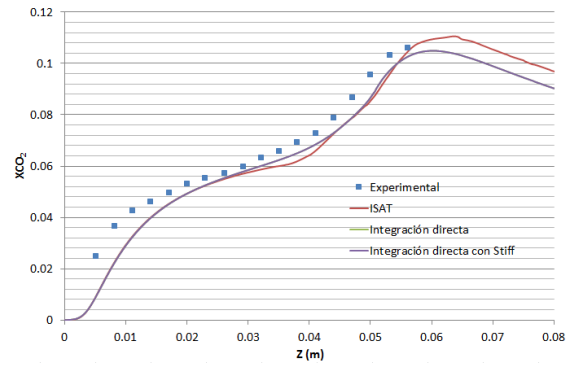
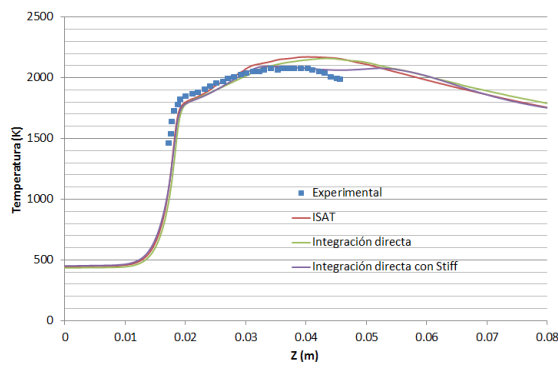
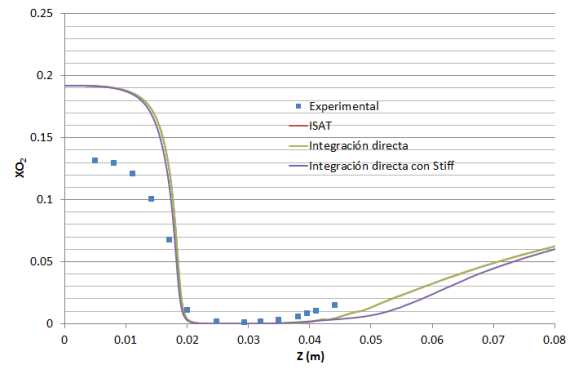
D.3.2. $\phi = \infty$ (a) Perfil de temperaturas para $\phi = \infty$ (b) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = \infty$ (c) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = \infty$ (d) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = \infty$

Figura D.6: Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del método de resolución de la cinética química para $\phi = \infty$

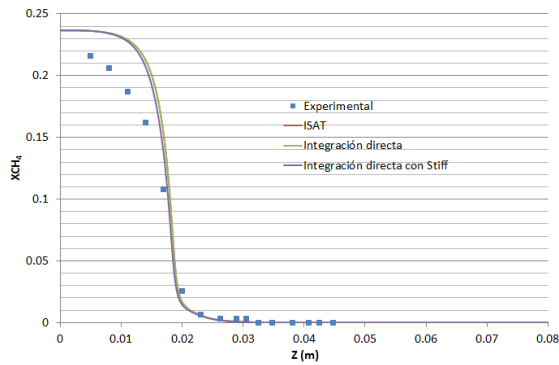
D.3.3. $\phi = 2,5$



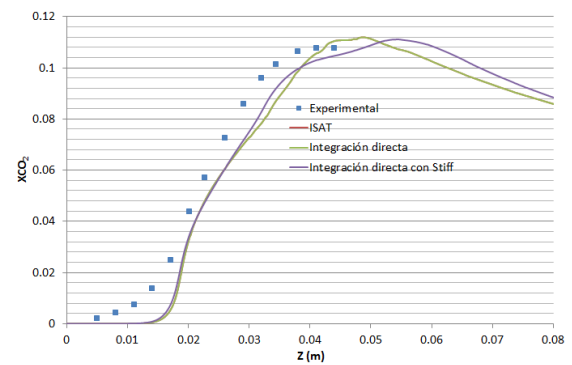
(a) Perfil de temperaturas para $\phi = 2,5$



(b) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = 2,5$



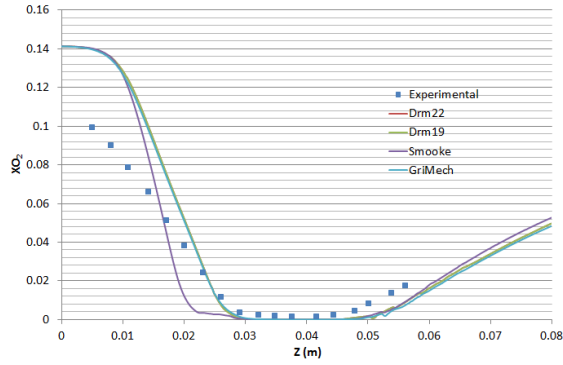
(c) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = 2,5$



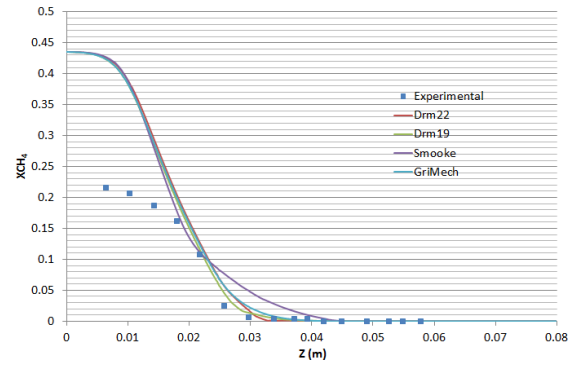
(d) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = 2,5$

Figura D.7: Graficas realizadas para el estudio de la influencia del método de resolución de la cinética química para $\phi = 2,5$

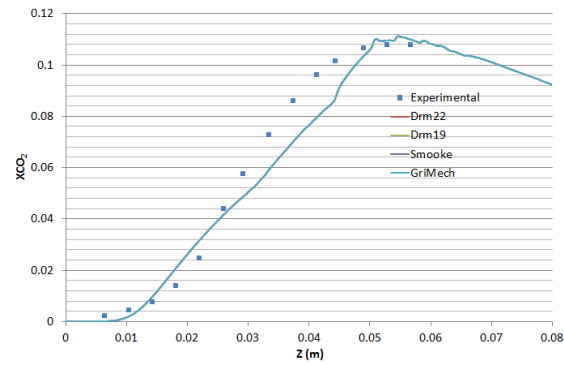
D.4. Influencia del mecanismo utilizado



(a) Perfil de la fracción molar de O_2 para $\phi = 6,2$



(b) Perfil de la fracción molar de CH_4 para $\phi = 6,2$



(c) Perfil de la fracción molar de CO_2 para $\phi = 6,2$

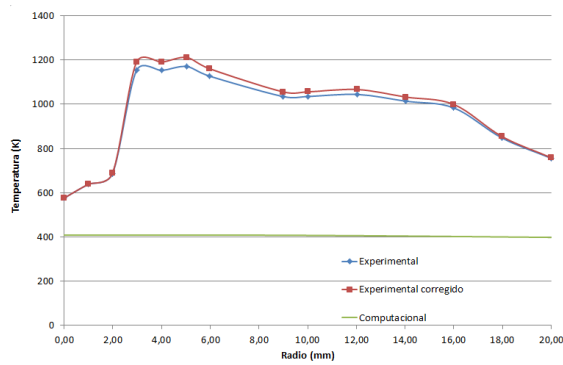
Figura D.8: Gráficas realizadas para el estudio de la influencia del mecanismo químico utilizado para $\phi = 6,2$

Apéndice E

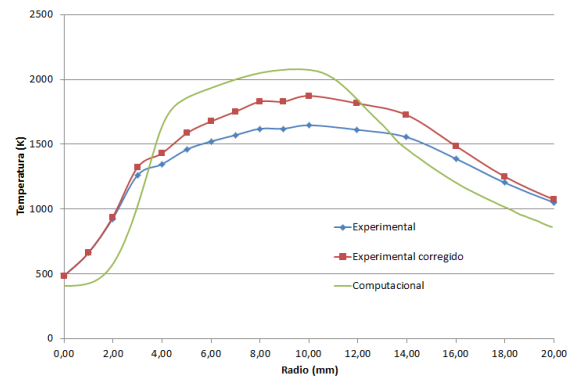
Gráficos sistema llama-pared

E.1. Llama 90°

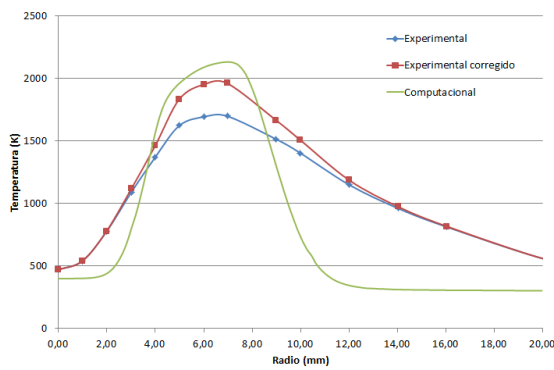
E.1.1. H=12 mm



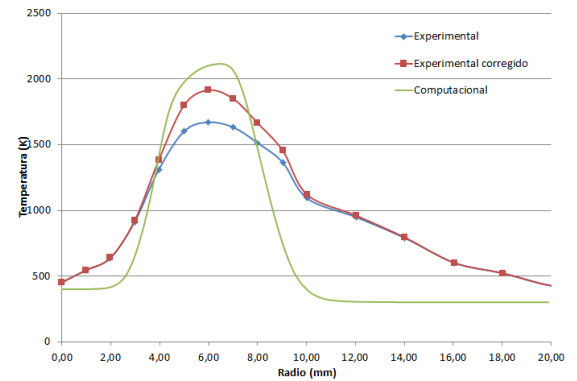
(a) Perfil de temperaturas para $z=12$ mm



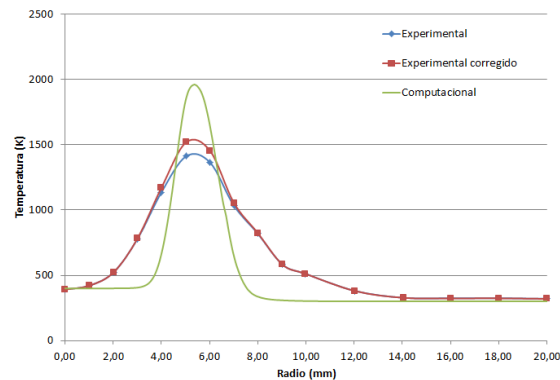
(b) Perfil de temperaturas para $z=8$ mm



(c) Perfil de temperaturas para $z=5$ mm



(d) Perfil de temperaturas para $z=4$ mm



(e) Perfil de temperaturas para $z=1$ mm

Figura E.1: Gráficas comparativas para $H=12$ mm y $\phi=90^\circ$ en función de la posición radial y la altura (z)

E.1.2. H=23 mm

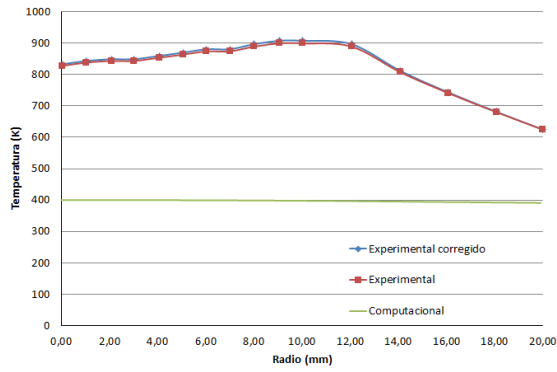
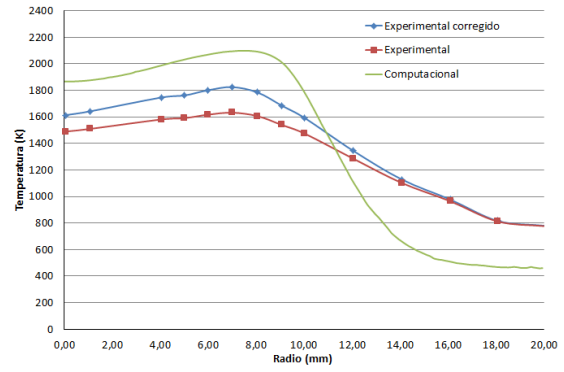
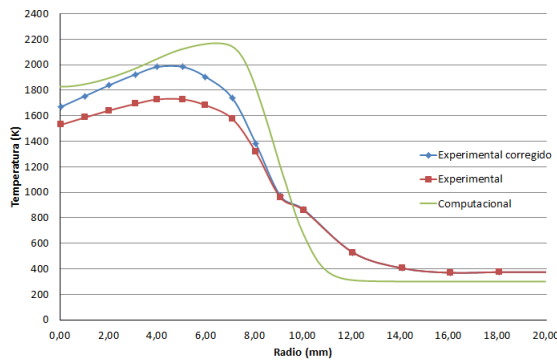
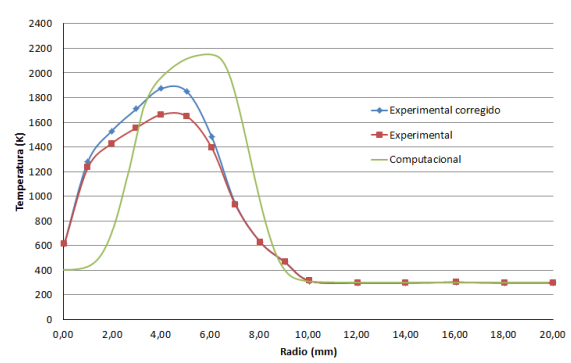
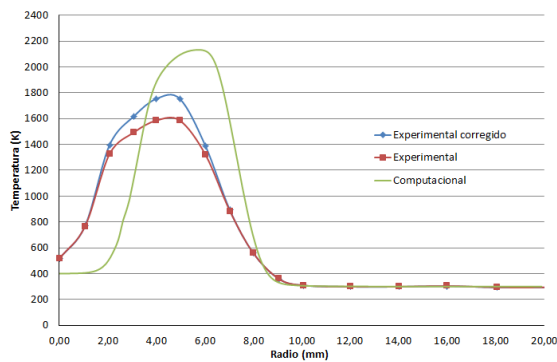
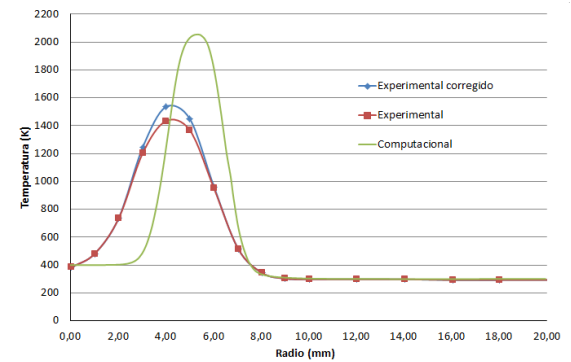
(a) Perfil de temperaturas para $z=23$ mm(b) Perfil de temperaturas para $z=19$ mm(c) Perfil de temperaturas para $z=15$ mm(d) Perfil de temperaturas para $z=7$ mm(e) Perfil de temperaturas para $z=5$ mm(f) Perfil de temperaturas para $z=2$ mm

Figura E.2: Gráficas comparativas para $H=23$ mm y $\phi=90^\circ$ en función de la posición radial y la altura (z)

E.1.3. H=38 mm

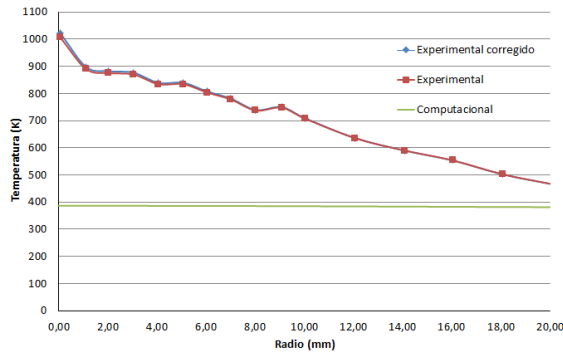
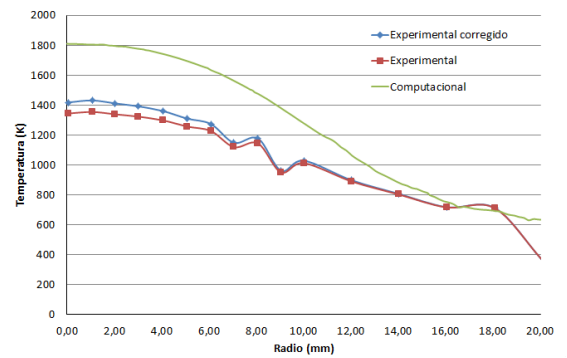
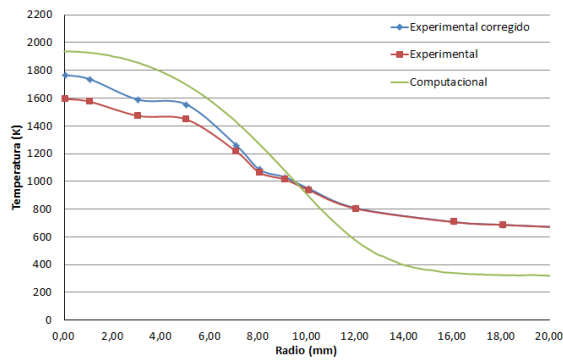
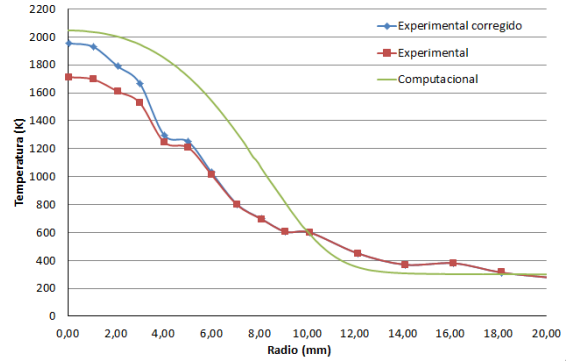
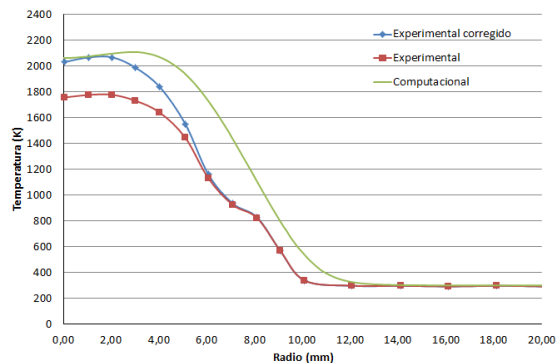
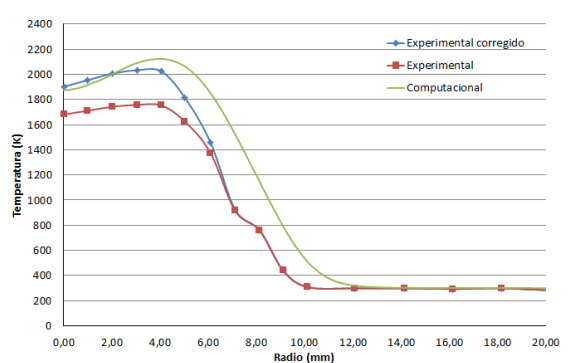
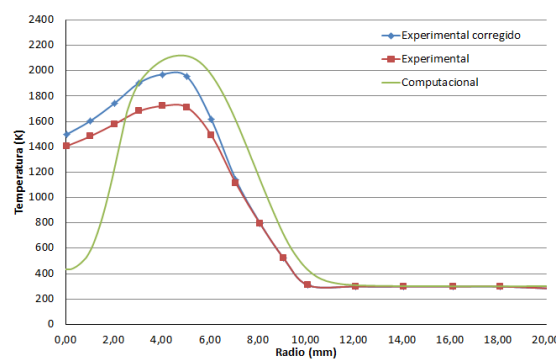
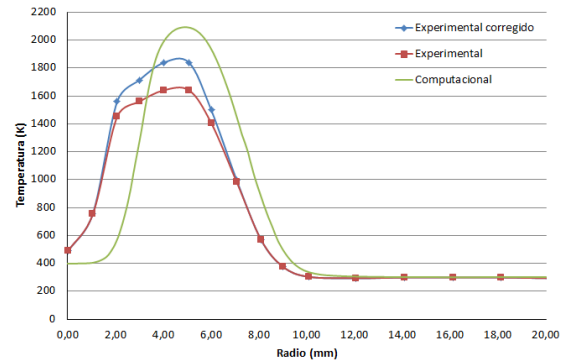
(a) Perfil de temperaturas para $z=38$ mm(b) Perfil de temperaturas para $z=35$ mm(c) Perfil de temperaturas para $z=32$ mm(d) Perfil de temperaturas para $z=27$ mm(e) Perfil de temperaturas para $z=19$ mm(f) Perfil de temperaturas para $z=15$ mm(g) Perfil de temperaturas para $z=9$ mm(h) Perfil de temperaturas para $z=5$ mm

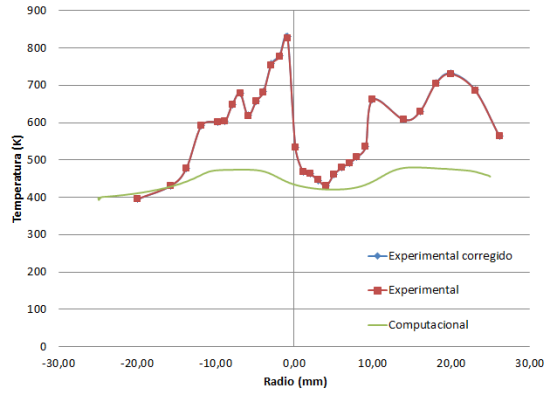
Figura E.3: Gráficas comparativas para $H=38$ mm y $\phi=90^\circ$ en función de la posición radial y la altura (z)

E.2. Llama 60°

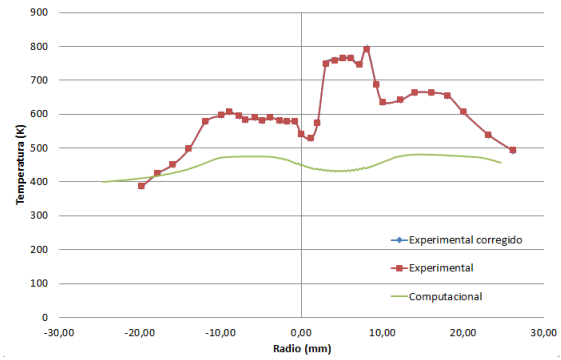
E.2.1. H=12 mm

Para la configuración de $H=12$ mm y un ángulo de 60° se tienen datos experimentales a $z=9$ mm y $z=12$ mm:

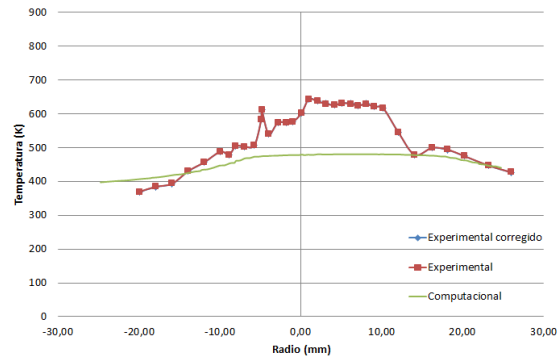
1. $z=12$ mm



(a) Perfil de temperaturas para $z=12$ mm y $x=0$ mm



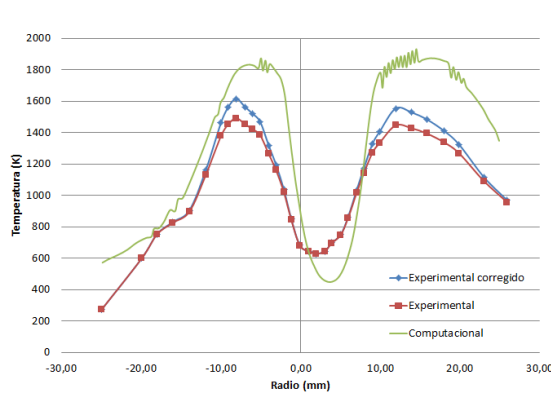
(b) Perfil de temperaturas para $z=12$ mm y $x=4$ mm



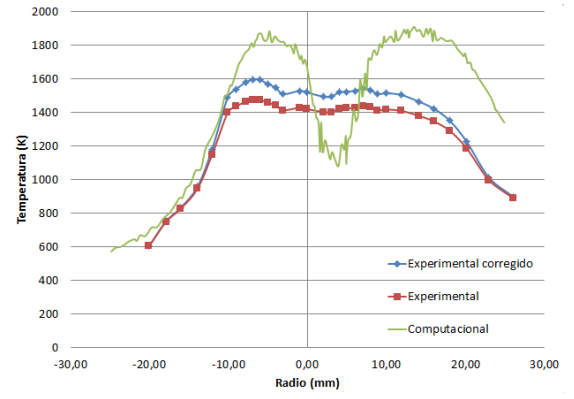
(c) Perfil de temperaturas para $z=12$ mm y $x=12$ mm

Figura E.4: Gráficas comparativas para $H=12$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=12$ mm

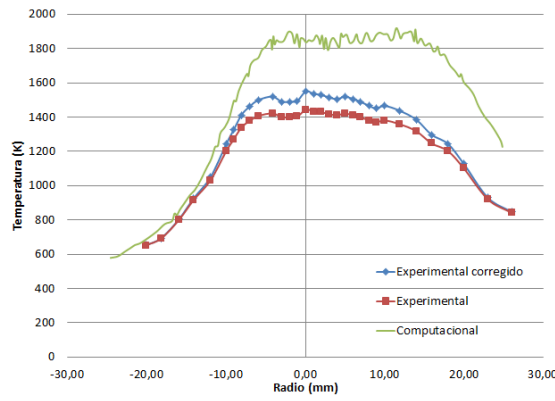
2. $z=9$ mm



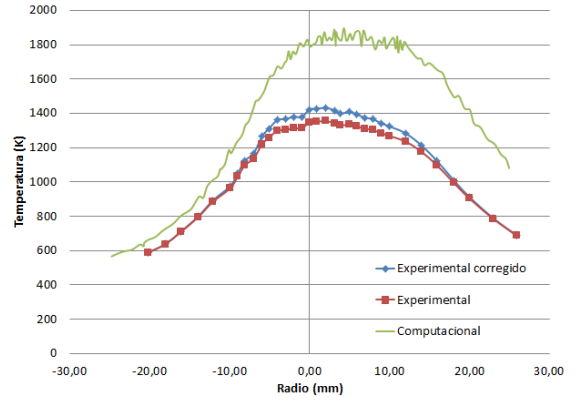
(a) Perfil de temperaturas para $z=9$ mm y $x=0$ mm



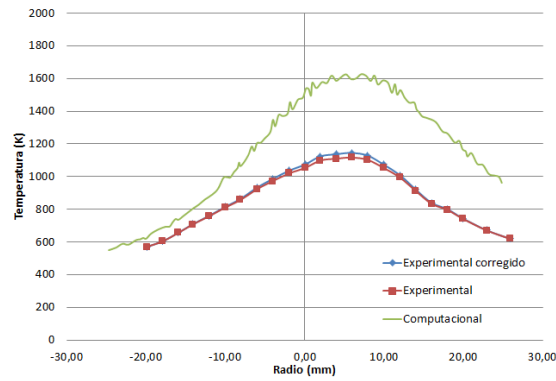
(b) Perfil de temperaturas para $z=9$ mm y $x=4$ mm



(c) Perfil de temperaturas para $z=9$ mm y $x=8$ mm



(d) Perfil de temperaturas para $z=9$ mm y $x=12$ mm



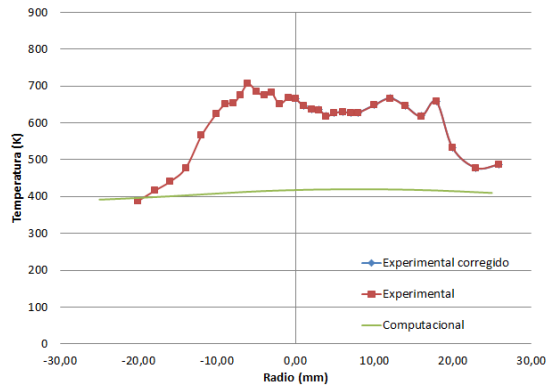
(e) Perfil de temperaturas para $z=9$ mm y $x=16$ mm

Figura E.5: Gráficas comparativas para $H=12$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=9$ mm

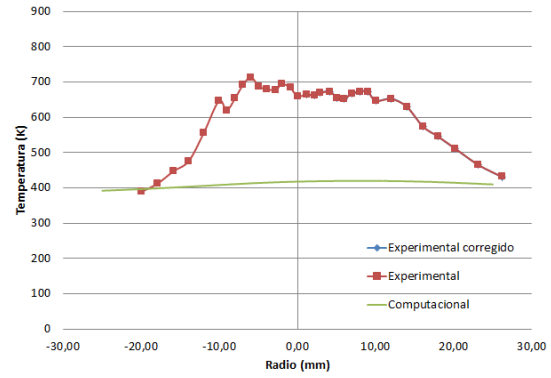
E.2.2. H=23 mm

Para la configuración de $H=23$ mm y un ángulo de 60° se tienen datos experimentales a $z=20$ mm y $z=23$ mm:

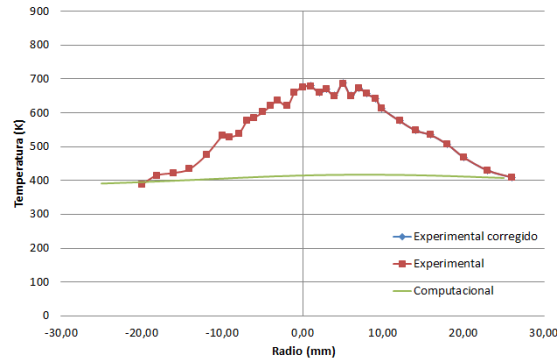
1. $z=23$ mm



(a) Perfil de temperaturas para $z=23$ mm y $x=0$ mm



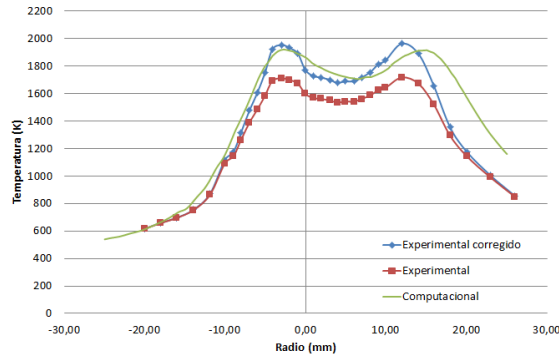
(b) Perfil de temperaturas para $z=23$ mm y $x=4$ mm



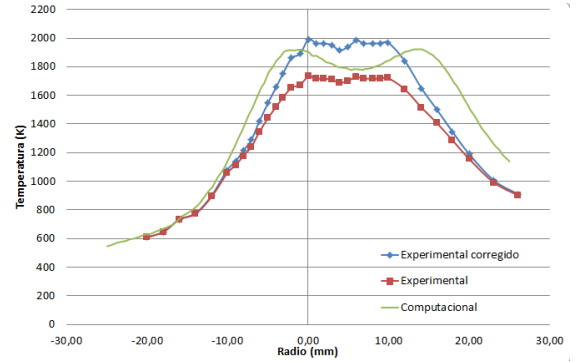
(c) Perfil de temperaturas para $z=23$ mm y $x=10$ mm

Figura E.6: Gráficas comparativas para $H=23$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=23$ mm

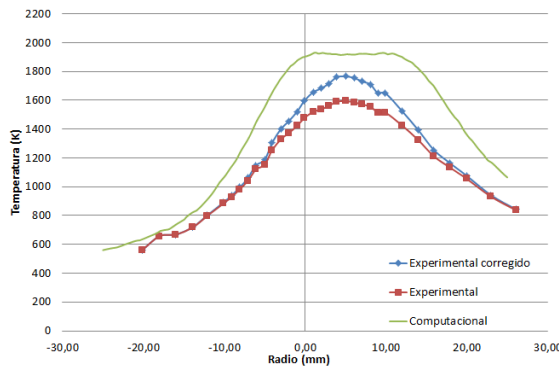
2. $z=20$ mm



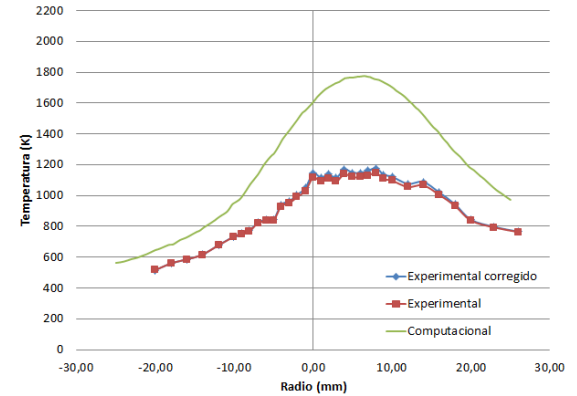
(a) Perfil de temperaturas para $z=20$ mm y $x=0$ mm



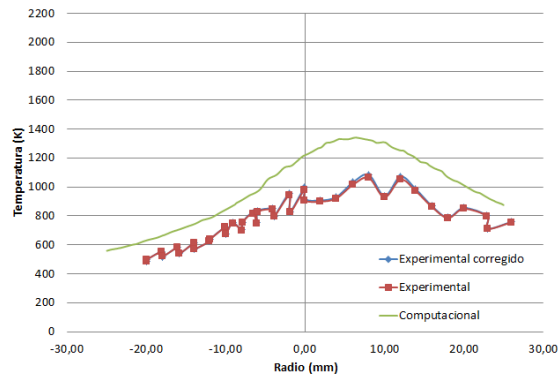
(b) Perfil de temperaturas para $z=20$ mm y $x=4$ mm



(c) Perfil de temperaturas para $z=20$ mm y $x=8$ mm



(d) Perfil de temperaturas para $z=20$ mm y $x=12$ mm



(e) Perfil de temperaturas para $z=20$ mm y $x=16$ mm

Figura E.7: Gráficas comparativas para $H=23$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=20$ mm

E.2.3. H=38 mm

Para la configuración de $H = 38$ mm y un ángulo de 60° se tienen datos experimentales a $z = 35$ mm y $z = 38$ mm:

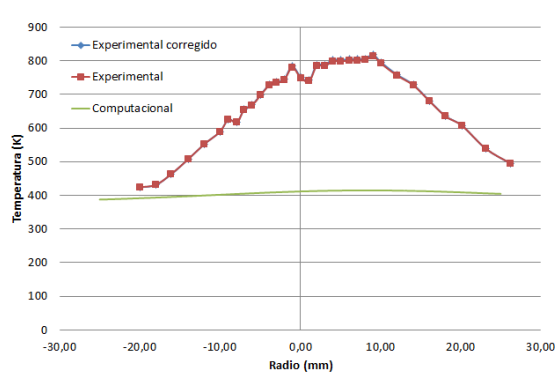
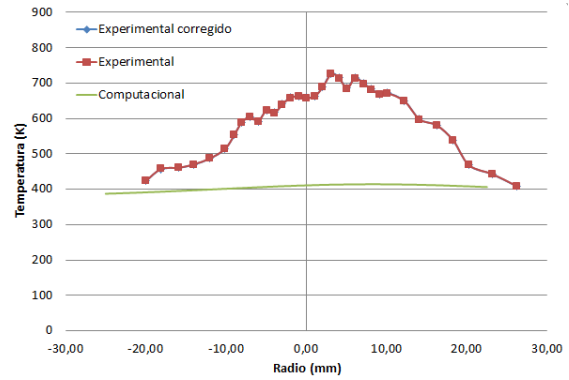
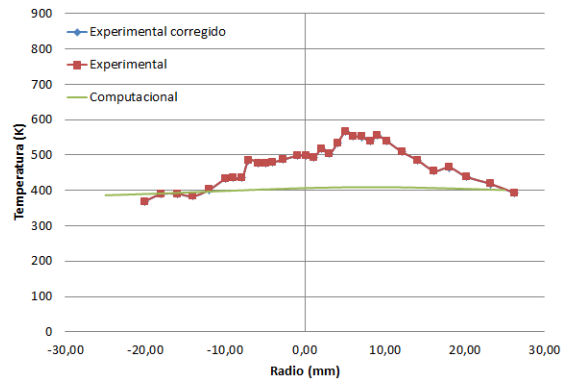
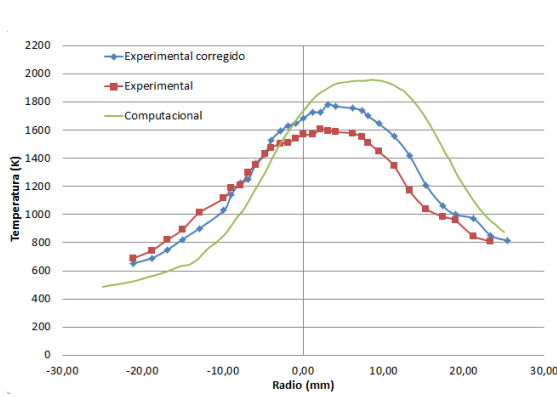
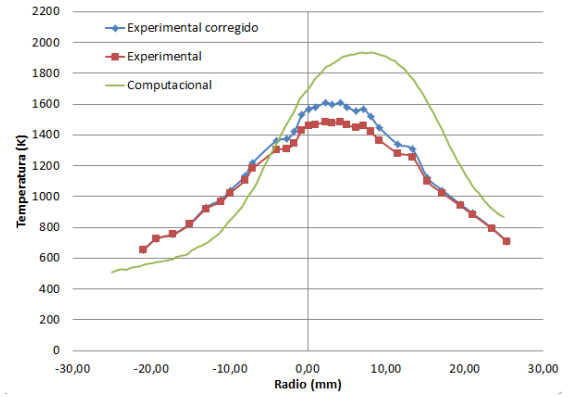
1. $z = 38$ mm(a) Perfil de temperaturas para $z = 38$ mm y $x = 0$ mm(b) Perfil de temperaturas para $z = 38$ mm y $x = 4$ mm(c) Perfil de temperaturas para $z = 38$ mm y $x = 12$ mm

Figura E.8: Gráficas comparativas para $H = 38$ mm y $\phi = 60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z = 38$ mm

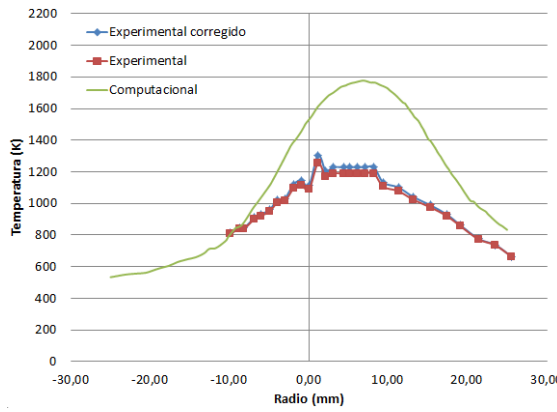
2. $z=35$ mm



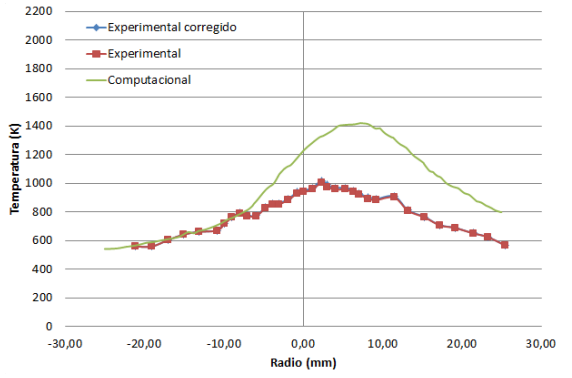
(a) Perfil de temperaturas para $z=35$ mm y $x=0$ mm



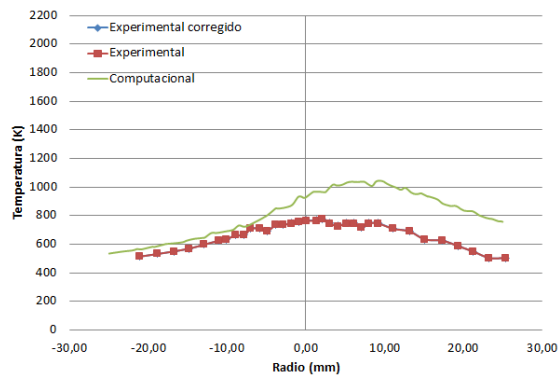
(b) Perfil de temperaturas para $z=35$ mm y $x=4$ mm



(c) Perfil de temperaturas para $z=35$ mm y $x=8$ mm

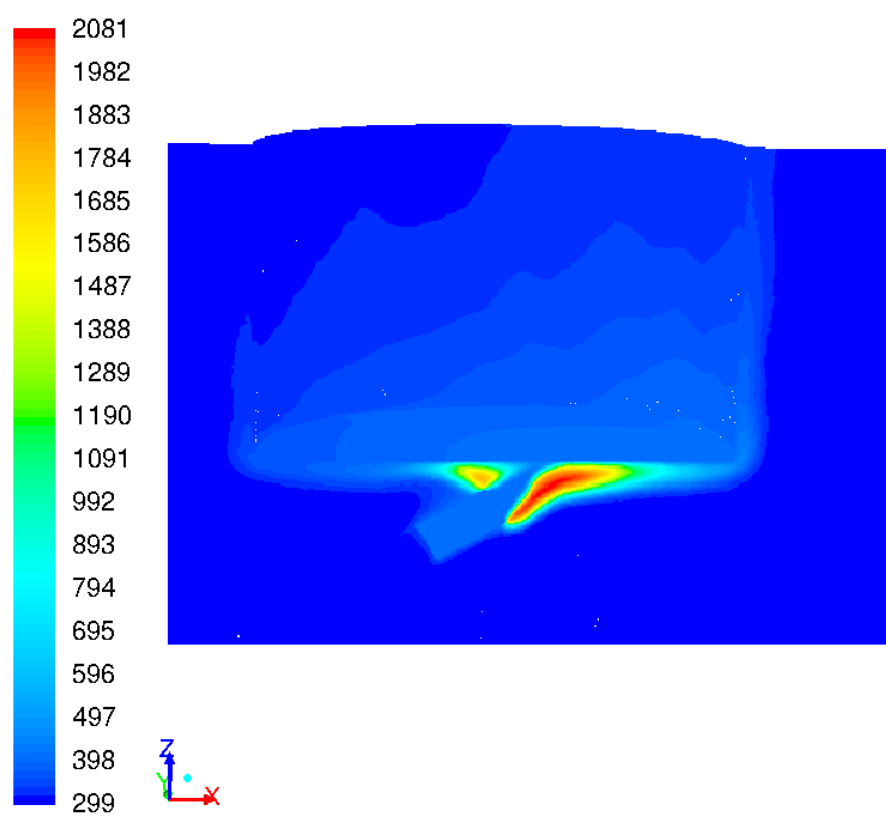


(d) Perfil de temperaturas para $z=35$ mm y $x=12$ mm



(e) Perfil de temperaturas para $z=35$ mm y $x=16$ mm

Figura E.9: Gráficas comparativas para $H= 38$ mm y $\phi=60^\circ$ en función de la posición radial y el eje longitudinal (x) para $z=35$ mm

E.3. Llama 30°Figura E.10: Perfil de temperatura para $H=12$ mm y 30°

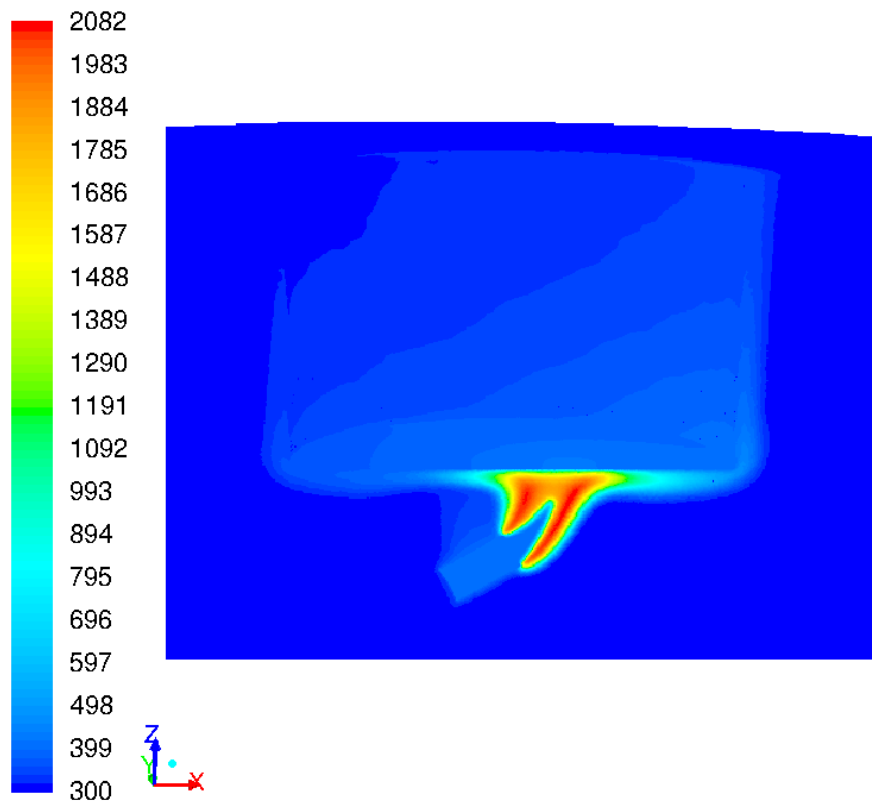
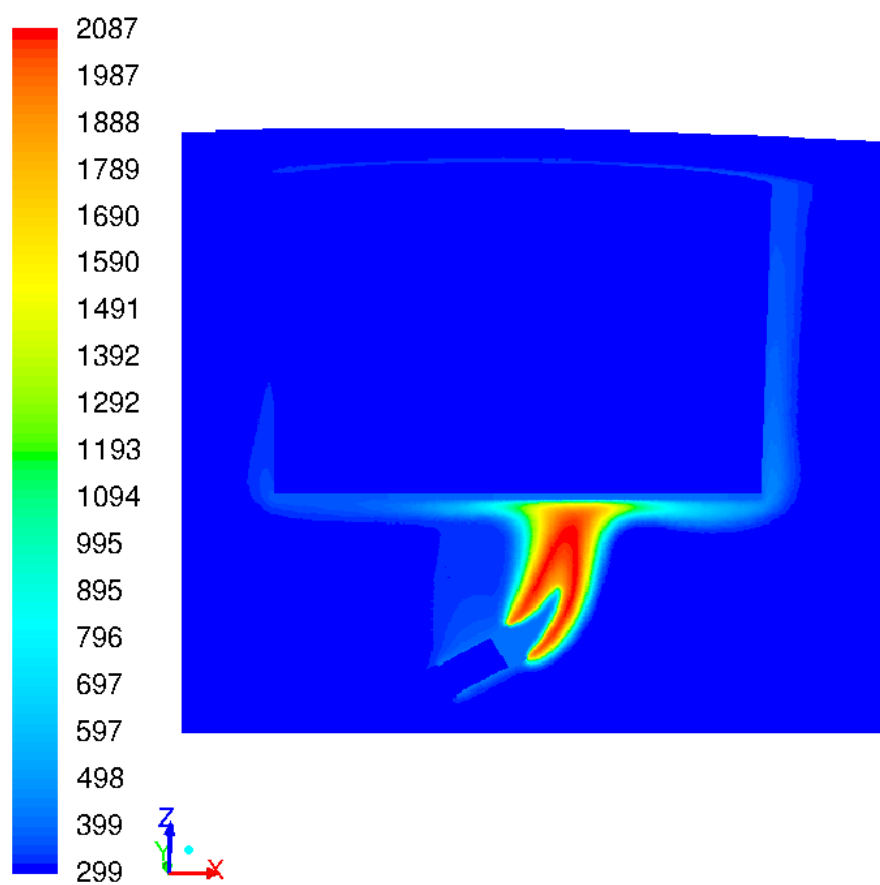


Figura E.11: Perfil de temperatura para $H=23$ mm y 30°

Figura E.12: Perfil de temperatura para $H=38$ mm y 30°

Bibliografía

- [1] MCENALLY, CHARLES S. Y PFEFFERLE, LISA D., (1999) *Experimental study of nonfuel hydrocarbon concentrations in coflowing partially premixed methane/air flames*. Department of Chemical Engineering and Center for Combustion Studies, Yale University.
- [2] SMOOKE, M. D., MCENALLY, C. S. Y PFEFFERLE, L. D., (1999) *Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame*. Yale Center for Combustion Studies, Yale University.
- [3] MCENALLY, CHARLES S. Y PFEFFERLE, LISA D., (1999) *Comparision of non-fuel hydrocarbon concentrations measured in coflowing nonpremixed flames fueled with small hydrocarbons*. Department of Chemical Engineering and Center for Combustion Studies, Yale University.
- [4] CLRAMUNT, K., CÒNSUL, R., PÉREZ-SEGARRA, C. D. Y OLIVIA, A., (2004) *Multidimensional mathematica modeling and numerical investigation of co-flow partially premixed methane/air laminar flames*. Combustion and Flame 137, 444-457.
- [5] HOU, SHUHN-SHYURNG Y KO, YUNG-CHANG, (2005) *Influence of oblique angle and heating height on flame structure, temperature field and efficiency of an impinging laminar jet flame*. Energy Conversion and Management 46, 941-958.
- [6] TUTTLE, S. G., WEBB, B. W. Y MCQUAY, M. Q., (2005) *Convective heat transfer from a partially premixed impinging flame jet. Part I: Time-averaged results*. International Journal of Heat and Mass Transfer 48, 1236-1251.
- [7] CHANDER, SUBHASH Y RAY, ANJAN, (2007) *Heat transfer characteristics of three interacting methane/air flame jets impinging on a flat surface*. International Journal of Heat and Mass Transfer 50, 640-653.
- [8] FLUENT USER'S GUIDE, (2012) *User's Guide, ANSYS FLUENT*.
- [9] FLUENT THEORY GUIDE, (2012) *Theory Guide, ANSYS FLUENT*.
- [10] BALLESTEROS, R., GONZÁLEZ, J., FERNÁNDEZ J. M., ARGÜELLES, K. M., (2003) *Técnicas numéricas en mecánica de fluidos*. Área de mecánica de fluidos. Universidad de Oviedo.

- [11] COSTA, J. M. (2005) *Diccionario de química física*. Ediciones Díaz de Santos.
- [12] GREGORY P. SMITH, DAVID M. GOLDEN, MICHAEL FRENKLACH, NIGEL W. MORIARTY, BORIS EITENEER, MIKHAIL GOLDENBERG, C. THOMAS BOWMAN, RONALD K. HANSON, SOONHO SONG, WILLIAM C. GARDINER, JR., VITALI V. LISSIANSKI, Y ZHIWEI QIN http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [13] WILLIAM S. SEESE, G. WILLIAM DAUB (2005) *Química*. Área de mecánica de fluidos. Pearson Educación, 320-321.