

Simulación de la estructura de llama en un quemador de premezcla parcial metano/aire en flujo concéntrico

Flame structure simulation in a methane/air coflow partially premixed burner

Julio Rendón*, Francisco Cadavid, Andrés Amell

Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Racional de la Energía, Universidad de Antioquia. Calle 67 N.º 53-108, Medellín, Antioquia, Colombia, AA 1226

(Recibido el 21 de septiembre de 2007. Aceptado el 29 de enero de 2007)

Resumen

En este trabajo se simuló el efecto del dosado relativo sobre la estructura de una llama laminar de premezcla parcial metano/aire, en un quemador atmosférico de flujo concéntrico. Se estudiaron 3 dosados relativos ($\Phi=1,6$, $\Phi=2,0$, $\Phi=3,5$), manteniendo constante la potencia térmica. Para la simulación se empleó FLUENT V. 6.2. Se compararon los perfiles radiales de temperatura y velocidad obtenidos con los reportados en la literatura y se estudió la influencia de la estructura de la malla en la solución. Así mismo, se definió un criterio para reportar la altura de la llama interna a partir del OH y se analizó el efecto del dosado relativo sobre la estructura de llama mediante los contornos de temperatura y especies. Se obtuvo la estructura típica de una llama de premezcla parcial, para todos los dosados relativos.

----- *Palabras clave:* llamas de premezcla parcial, simulación de la combustión, llamas laminares metano/aire, quemador en flujo concéntrico.

Abstract

The effect of the equivalence ratio on the partially premixed methane / air laminar flame structure, in a coflow atmospheric burner was simulated. Three equivalence ratios were studied ($\Phi=1.6$, $\Phi=2.0$, $\Phi=3.5$) keeping constant the

* Autor de correspondencia: teléfono: + 57 + 4 + 219 55 29, fax: + 57 + 4 + 219 55 18, correo electrónico: jrendon@udea.edu.co (J. Rendón).

released energy. The simulation was carried out using *FLUENT V 6.2*. The radial profiles of temperature and velocity were compared with the experimental data. The influence of the mesh structure in the solution was studied. A criterion to report the height of the flame from the OH profile was also defined. The effect of the equivalence ratio on the flame structure was analyzed from temperature and species contours. The typical structure of a partially premixed flame for the three equivalence ratios was obtained.

----- *Keywords:* partially premixed flame, combustion simulation, methane/air laminar flames, coflow burner.

Introducción

Las llamas de premezcla parcial son de uso extendido como fuente de calor en aplicaciones residenciales, comerciales e industriales pues permiten reducir los volúmenes de las cámaras de combustión, alcanzar temperaturas más altas que las obtenidas con llamas de difusión y evitar la formación de hollín sobre las paredes, además, los quemadores se caracterizan por ser de fácil construcción y por tener bajos costos de operación. En este tipo de quemadores la premezcla combustible-aire se forma por la inducción de aire debido al intercambio de *momentum* entre el combustible descargado y el aire atmosférico [1]. Este tipo de quemadores permiten variar la cantidad de aire inducido para obtener diferentes dosado relativos.

En una llama laminar de premezcla parcial se distinguen tres zonas, un cono interior, un frente de llama o cono azul y un cono exterior. En el cono interior se precalienta la mezcla. En el frente de llama ocurre una oxidación parcial del combustible con el aire de la premezcla (combustión de premezcla) y en el cono exterior se oxida el combustible restante por la difusión del oxígeno presente en la atmósfera-(combustión de difusión). Esto se denomina en la literatura como estructura de doble llama. El efecto del dosado relativo sobre la estructura de llamas laminares de premezcla parcial ha sido estudiado experimentalmente por varios autores [2, 3, 4] bajo diferentes condiciones de operación. Entre los cuales, se destaca el desarrollado por Gore y Zhan [2], por el amplio rango de dosado relativos que emplearon (2, ∞) y el cual sirvió de base a Blevins *et al* [4] quienes contribuyeron al entendimiento del proceso de formación de NO_x a partir de un estudio basado en 3 dosado relativos. En el campo de la simulación numérica se encuentran algunos trabajos que también estudian el efecto del dosado relativo sobre la estructura de la llama y las emisiones.[5, 6, 7] destacándose el de Bennett *et al.* [5] quienes simularon llamas de premezcla parcial en un amplio rango ($\Phi=\infty$) hasta ($\Phi=2,464$).

Los trabajos revisados presentan dos conclusiones en común sobre el efecto del dosado relativo en

la estructura de una llama de premezcla parcial. Primero, para dosado relativos mayores a uno; conforme aumenta el dosado relativo la estructura de la llama experimenta un paulatino cambio de la estructura de doble llama, a la estructura de una llama de difusión, en las que no se observa un frente de llama y aparece una punta amarilla. Segundo, la altura de la llama aumenta con el aumento del dosado relativo. En este punto se debe aclarar que no existe un criterio único para definir la altura de la llama; en algunos trabajos se reporta la altura visible de la llama, bien sea la altura de la llama interna o la llama de difusión [2, 3] mientras que en otros se reporta la altura de la llama asociada al proceso de combustión, es decir, de acuerdo a la concentración de una especie o la temperatura, [5, 8, 9].

El objetivo del presente trabajo es establecer una metodología de cálculo para validar el proceso de simulación de llamas de premezcla parcial metano/aire, empleando el software comercial *FLUENT v. 6.2*, a partir de la comparación de los resultados numéricos con los reportados en el trabajo de Blevins *et al.* [4]. En el trabajo se discuten aspectos como la geometría del dominio, la estructura del mallado y los modelos numéricos utilizados en la simulación. Se comparan los perfiles numéricos con los experimentales de temperatura y velocidad, en diferentes posiciones de la llama y se describe el efecto del dosado relativo sobre la estructura de la llama. A partir de la validación se busca iniciar una cultura de la simulación de la combustión en el medio, que permita hacer más frecuente el uso de esta herramienta en el diseño de sistemas de combustión.

Problema y metodología

Definición del problema

En el trabajo numérico se reproducen las condiciones experimentales definidas en la referencia [4], para la simulación de la combustión de tres premezclas parciales metano/aire en un quemador de flujo concéntrico. Un esquema del quemador se muestra en la figura 1.

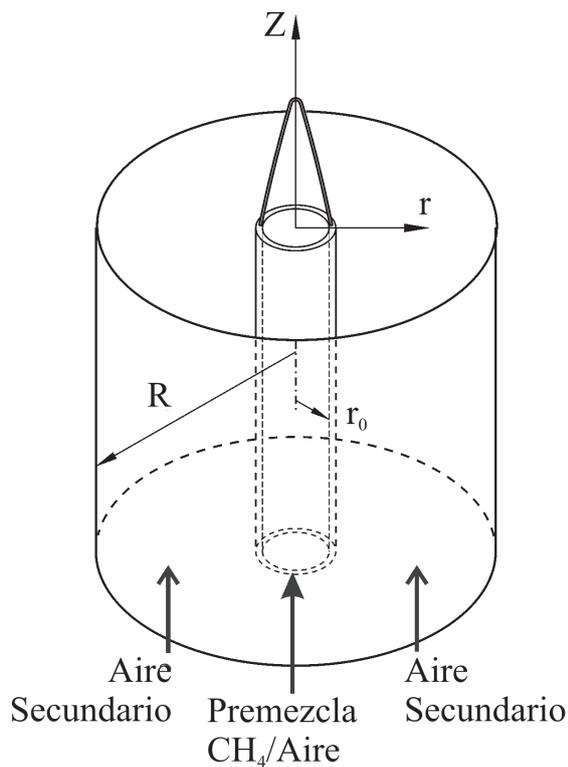


Figura 1 Esquema quemador de flujo concéntrico

El quemador está compuesto por dos tubos concéntricos de radios ($r_0 = 15 \text{ mm}$) y ($R = 50 \text{ mm}$). La pmezcla combustible/aire se descarga a través del tubo central mientras el aire secundario se descarga a través de la región anular. Aprovechando la simetría axial del problema se elaboró un dominio bidimensional, el cual se muestra en la figura 2.

Con el ánimo de estudiar el efecto que la frontera lateral podría tener sobre la simulación se varió el radio exterior (R_2) del dominio. La primera opción consideró $R_2 = 50 \text{ mm}$ y la segunda $R_2 = 175 \text{ mm}$. La figura 3 muestra los contornos de temperatura para los dos dominios.

En la Figura 3 (b) se observa que los perfiles de temperatura están distorsionados debido a la presencia de la pared. Esto indica que el tipo de frontera seleccionado, así como la cercanía de ésta a la zona de combustión tienen un efecto

significativo sobre la simulación. Para atenuar el efecto pared sobre la combustión, en este trabajo se optó por retirar la pared lateral de la zona de reacción, definiendo como radio exterior del dominio $R_2 = 175 \text{ mm}$. La longitud del dominio se fijó en $L = 640 \text{ mm}$ para permitir el completo desarrollo de la combustión dentro del dominio y atenuar el efecto que la salida de los productos de combustión podrían tener sobre la simulación. La configuración del dominio descrita anteriormente, introdujo una modificación del flujo másico de aire secundario entregado, respecto al del trabajo experimental. Sin embargo, para no alterar las condiciones aerodinámicas del trabajo experimental, se mantuvo constante el *flux* másico de aire secundario. Los dosados relativos a emplear en el presente estudio, están referidos a la pmezcla primaria, es decir, se calculan a partir de los flujos de aire primario y gas metano. La potencia térmica del quemador es $2,1 \text{ kW}$ (con base en el PCI del CH_4). En la simulación se utilizó como comburente aire (21 \% O_2 , \% en Vol.).

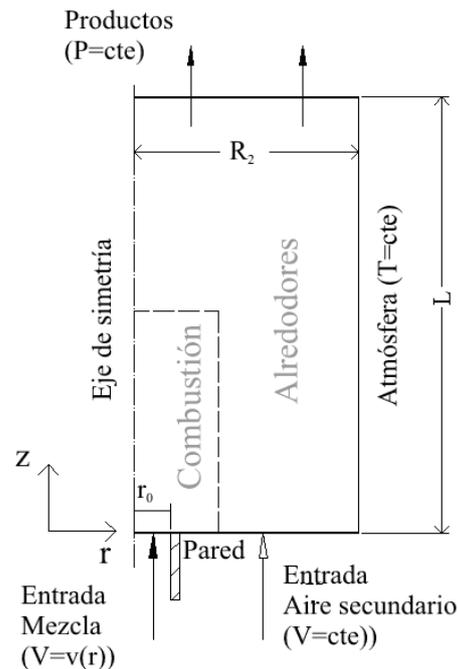


Figura 2 Dominio de simulación y condiciones de frontera

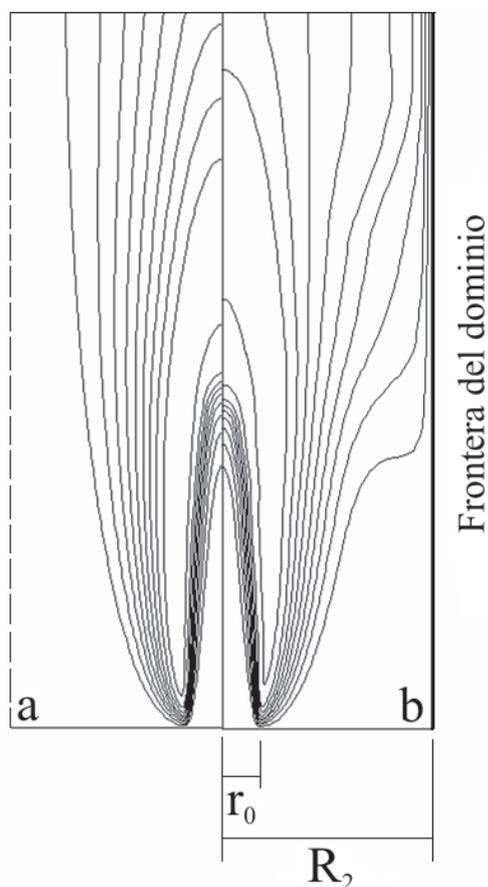


Figura 3 Efecto de la dimensión radial del dominio sobre los contornos de temperatura. (a) radio 175 mm, (b) radio 50 mm

Los flujos de aire y combustible para los tres dosados relativos estudiados se muestran en la tabla 1.

Tabla 1 Condiciones de flujo empleadas

Φ	Flujo másico [mg/s]		
	AP	CH ₄	AS
1,6	450	42	11415
2,0	360	42	11505
3,5	205	42	11660

Estructura del mallado

La selección del mallado a utilizar se inició con el estudio de la independencia de la solución al número de mallas. Los resultados de dichas simulaciones

mostraron que no existía diferencia significativa en la solución al pasar de 8 500 mallas a 35 000 mallas. Posteriormente, se analizó la influencia de la geometría del mallado sobre la estructura de la llama de premezcla manteniendo el mismo número de mallas (alrededor de 8 000 mallas). Se estudiaron dos mallados: uno rectangular y otro trapezoidal. La figura 4 muestra ambas estructuras.

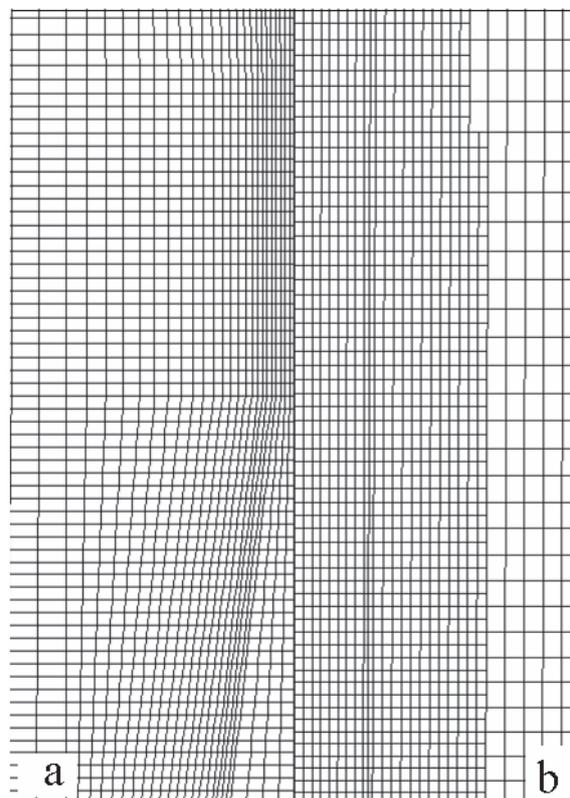


Figura 4. Geometría de las mallas estudiadas. (a) Malla Trapezoidal, (b) Malla Rectangular

El objetivo de la malla trapezoidal era tener un mallado más fino en la región próxima al frente de llama. Para definir esta zona se partió del espesor del frente de llama y la velocidad de deflagración, para una mezcla estequiométrica metano/aire [10]. Para caracterizar el mallado se definió el parámetro densidad de mallado (ρ_M); como la relación del # de mallas al área cubierta, expresada en cm². La tabla 2 presenta las densidades de malla para ambas estructuras.

Tabla 2 Características de las mallas estudiadas

Malla	$\rho_{M'ZC}$	ρ_{MA}	# Total de mallas
Rectangular	58,1	5,5	8710
Trapezoidal	52,6	5,3	7850

Debido a que el proceso de combustión ocurre en una porción del dominio se han establecido dos densidades de mallas diferentes. Una para la zona de combustión y otra para los alrededores. En la sección 3.1 se presenta la comparación de algunos resultados empleando estos dos tipos de mallas.

Condiciones de frontera

En la figura 2 se ilustra un esquema del dominio de cálculo, en el que se muestran las fronteras. A continuación se describe cada una de estas. El puerto del quemador, por donde se descarga la mezcla, es una frontera del tipo entrada de velocidad en la cual se especificó el perfil de velocidad. Un proceso de simulación previo, permitió determinar el perfil de velocidades en el puerto, el cual se ajusta a una función del tipo:

$$V(r) = V_{\max} \cdot \left(1 - \frac{r}{r_0}\right)^n$$

con n entre 0,285 y 0,315, dependiendo del dosado relativo. Lo anterior evidencia que el flujo no es laminar para ninguno de los tres dosados relativos, pero tampoco es turbulento completamente desarrollado. Un cálculo del Re en esta sección reveló que el flujo se encontraba en la región de transición. La entrada del aire secundario también es una frontera del tipo entrada de velocidad, para la cual se especificó el valor medio de velocidad calculado del flujo másico reportado. Para ambas condiciones de entrada se supuso que solo existía la componente axial. La pared del tubo, por el que se descarga la premezcla, se considera aislada térmicamente. La condición de frontera para la salida de los productos es del tipo salida de presión y se especificó igual a la atmosférica. La

condición en la pared que representa la atmósfera es una isoterma a 298 K.

Modelos numéricos

El proceso de simulación de la combustión parte de resolver las ecuaciones de conservación de materia, especies, cantidad de movimiento, energía, la ecuación de estado de gas ideal y las ecuaciones de la cinética de reacción [11]. Para la simulación se empleó el código comercial de CFD (Dinámica de Fluidos Computacional), *FLUENT v 6.2*, el cual emplea el método de los volúmenes finitos para resolver la forma integral de las ecuaciones de transporte en el dominio. Para la solución de las ecuaciones se empleó el método segregado, el cual consiste en resolver de manera secuencial las ecuaciones en cada iteración. El proceso inicia con la actualización de los valores nodales de las variables de interés, segundo se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento, tercero se verifica la continuidad, de no cumplirse se resuelve la ecuación para la corrección de la presión, empleando el método *SIMPLE*, hasta que se cumpla la continuidad, cuarto se resuelven las ecuaciones para los demás escalares (energía, especies, turbulencia), quinto se verifica el criterio de convergencia y se decide si se detiene el proceso o se comienza otra iteración [12]. Para simular el proceso de oxidación del metano se empleó un mecanismo cinético reducido compuesto de 17 especies, y 58 reacciones reversibles [13]. Para la solución de la cinética química se empleó el modelo de tasa de reacción laminar [7,14]. El sistema de ecuaciones diferenciales que el algoritmo debe resolver se considera un sistema rígido (*stiff*), debido a la diferencia en las escalas temporales asociadas a la formación y destrucción de especies químicas, esto genera inestabilidades en el algoritmo que hacen que la solución diverja. Para solucionar esta dificultad, el software incorpora el algoritmo (*Stiff Chemistry Solver*), en el cual la selección del paso de integración está basado en el valor mínimo entre la escala de tiempo convectiva y la difusiva en la celda [14]. Otro algoritmo que se empleó para la simulación fue el *ISAT (In-Situ Adaptive Tabu-*

lation) [15], el cual permitió disminuir el tiempo requerido para la simulación. Para resolver las ecuaciones de flujo se emplea el esquema de discretización *upwind* de primer orden, mientras para la ecuación de especies y energía se empleó el esquema *upwind* de segundo orden. Para resolver la componente de los esfuerzos viscosos en la ecuación de cantidad de movimiento fue necesario emplear el modelo de flujo turbulento ($k-\varepsilon$). En la figura 5 se comparan los contornos de temperatura empleando un modelo de flujo laminar y un modelo de flujo turbulento.

En la figura 5 se observa que al emplear el modelo de flujo laminar, los contornos de temperatura revelan un estiramiento de la llama de premezcla y el desprendimiento de ésta del puerto. Esto indica que, para el número de mallas utilizado, el modelo de flujo laminar no logra resolver de manera conveniente lo que sucede en el frente de llama, en particular en la punta del frente. Chou *et al.* [16] reportan que la punta del frente es una región altamente demandante en la densidad de malla debido al estiramiento y curvatura que la llama presenta. En este trabajo se compensa la baja densidad de malla en la punta del frente de llama con un aumento en los coeficientes de difusión y en la viscosidad de la mezcla, gracias a la incorporación de un modelo de flujo turbulento, lo que permite obtener una estructura de llama similar a la que se obtiene en condiciones experimentales.

Las fuerzas de cuerpo debidas al campo gravitacional fueron incluidas en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección axial, por cuanto al calcular el número de Froude (Fr) [16] en la entrada del aire secundario se encontró $Fr=0,13$, lo que indica que las fuerzas de flotación tienen mayor relevancia que las inerciales. Dado que el aire secundario es parte fundamental del proceso de combustión, se justifica la inclusión de las fuerzas de cuerpo. Las simulaciones fueron desarrolladas en un computador de escritorio con procesador Pentium 4D de 3,0 GHz, y con 1 GB de RAM. El tiempo normal para el proceso completo de simulación fue de 12 horas.

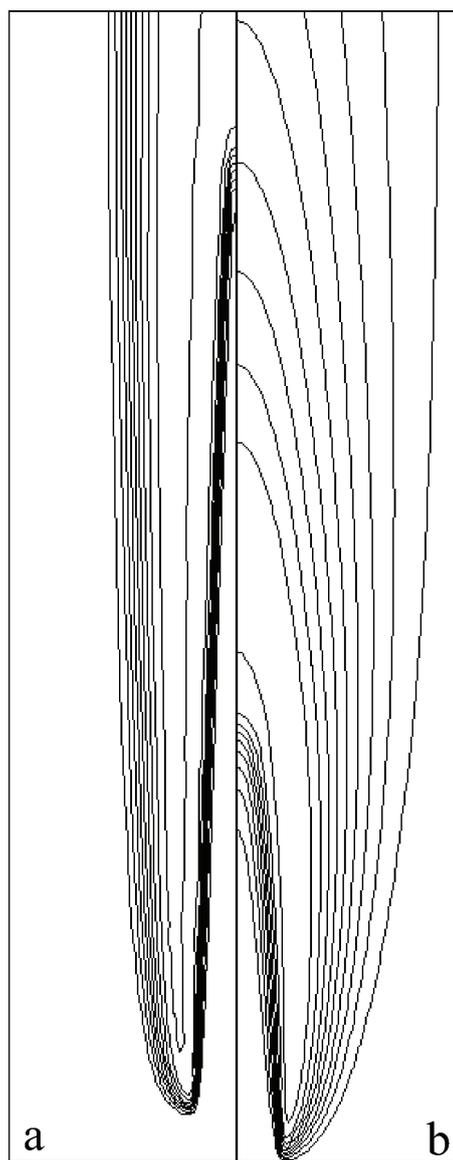


Figura 5 Efecto del modelo de flujo sobre la estructura de llama (a) Turbulento ($k-\varepsilon$), (b) Laminar

Análisis de resultados

Efecto de la estructura de la malla

El efecto de la geometría del malla sobre la estructura de llama se muestra en la figura 6. Al comparar los resultados se observa que el malla trapezoidal permitió obtener una llama anclada

da al puerto del quemador, mientras que el mallado rectangular, produce una llama desprendida alrededor de 4 mm de este. Lo anterior se tomó como criterio para escoger la malla trapezoidal.

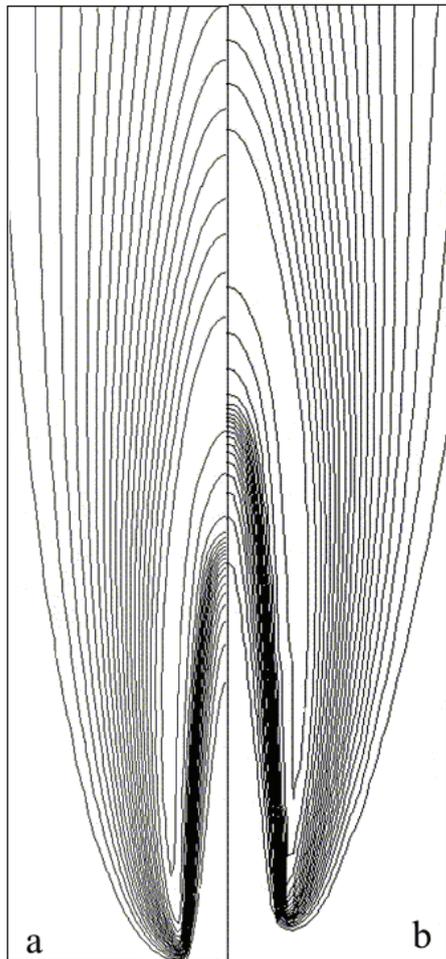


Figura 6 Efecto de la malla sobre la estructura de llama, $\Phi=1,6$. (a) Mallado trapezoidal (b) Mallado rectangular

De la anterior comparación se resalta que la ubicación de las mallas más finas en la zona de reacción es determinante en la formación de una llama estable. En este caso la ubicación de las mallas más finas sobre una región en la que se esperaba la formación del frente de llama permitió que ésta se formara. Si bien en el trabajo se

empleó una baja densidad de mallas en la zona de reacción (50 mallas/cm²), comparadas con las densidades de mallas de otros trabajos numéricos (>2500 mallas/cm²) [5, 17], la utilización de un modelo de turbulencia ($k-\epsilon$) para el flujo, permitió obtener resultados satisfactorios.

Comparación entre resultados experimentales y numéricos

En la figura 7 se comparan los perfiles radiales de temperatura (T) y velocidad axial (U), medidos en el trabajo de Blevins *et al* [4], y los calculados mediante la simulación numérica. La comparación se realizó para $\Phi=1,6$, tomando los perfiles a 3 alturas sobre el puerto del quemador (20 mm, 40 mm y 60 mm).

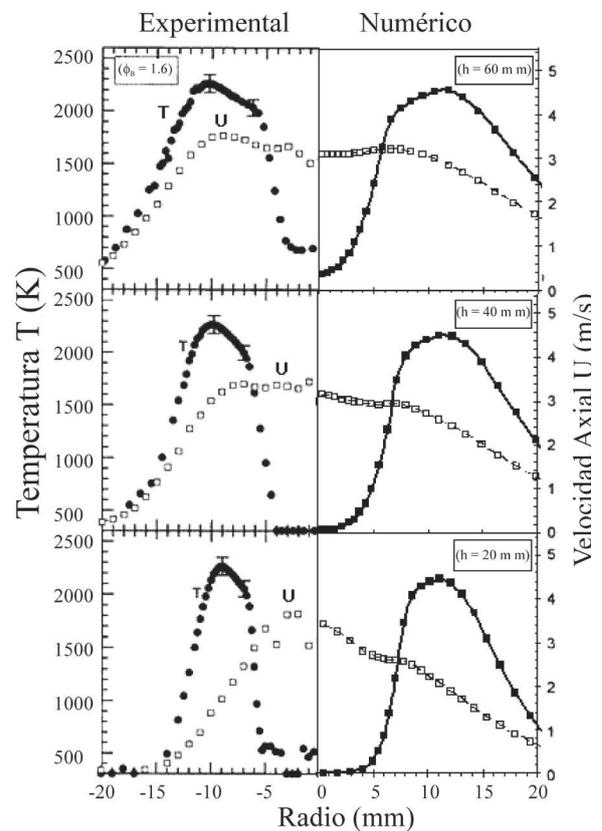


Figura 7 Perfiles radiales de temperatura y velocidad axial, $\Phi = 1,6$

La primera comparación que se hace entre los perfiles de temperatura es el valor máximo que esta alcanza en cada nivel. Para el caso experimental este valor se encuentra entre 2173 K y 2347 K, mientras para el caso numérico se encuentra entre 2150 K y 2186 K. Estos últimos, además de ser similares a los experimentales guardan consistencia con el valor de la temperatura adiabática de llama para la mezcla estequiométrica de metano/aire (2230 K). Se observa además una buena correspondencia entre los perfiles experimentales y los numéricos en cada altura, encontrando diferencias en las posiciones radiales en las cuales ocurren los máximos de temperatura. La forma del perfil muestra dos zonas de aumento de temperatura, la primera con alta pendiente corresponde a la combustión de premezcla, la segunda con pendiente más baja, corresponde a la combustión por difusión. Si bien se tienen perfiles parecidos y valores máximos cercanos, se debe advertir que la simulación predice valores más altos de temperatura en las zonas circundantes de la llama, comparados con los valores experimentales. Esta discrepancia puede obedecer a la no inclusión de un modelo de radiación en la simulación o a la utilización de un mecanismo cinético reducido.

Los perfiles de velocidad, al igual que los de temperatura, presentan formas similares a los experimentales. Lo que se puede resaltar, es la progresiva disminución de la velocidad en el eje de la llama con la altura y el aumento de la misma en la zona comprendida entre 5 mm y 10 mm. Esto se puede explicar por el principio de conservación de la cantidad de movimiento, aplicada a un chorro que se descarga en una atmósfera en reposo [18]. Si bien la formación del frente de llama altera significativamente el campo de velocidades, este proceso ocurre de forma más marcada en el frente de llama y en las regiones externas a este. En la figura 8 se comparan los perfiles radiales de temperatura y el radical CH, a una altura de 60 mm sobre el puerto, para los tres dosado relativo.

De los perfiles experimentales se observa que a mayor dosado relativo menor temperatura máxima en la llama, esto puede explicarse por la com-

bustión incompleta que se favorece a medida que el dosado relativo aumenta. En el punto de comparación ($h = 60$ mm) los resultados numéricos no revelan este efecto del dosado relativo sobre la temperatura máxima. Sin embargo se observa que la forma de los perfiles numéricos cambia conforme aumenta el dosado relativo. Para $\Phi=1,6$, se observan dos zonas con aumento de temperatura, mientras para $\Phi=3,5$ solo se observa una zona de aumento con un ligero cambio en la pendiente cerca a la máxima temperatura. Una tendencia similar presentan los perfiles experimentales lo cual se asocia a la transición en el proceso de combustión de premezcla a difusión, conforme aumenta el dosado relativo, tal como se reporta en la literatura [19].

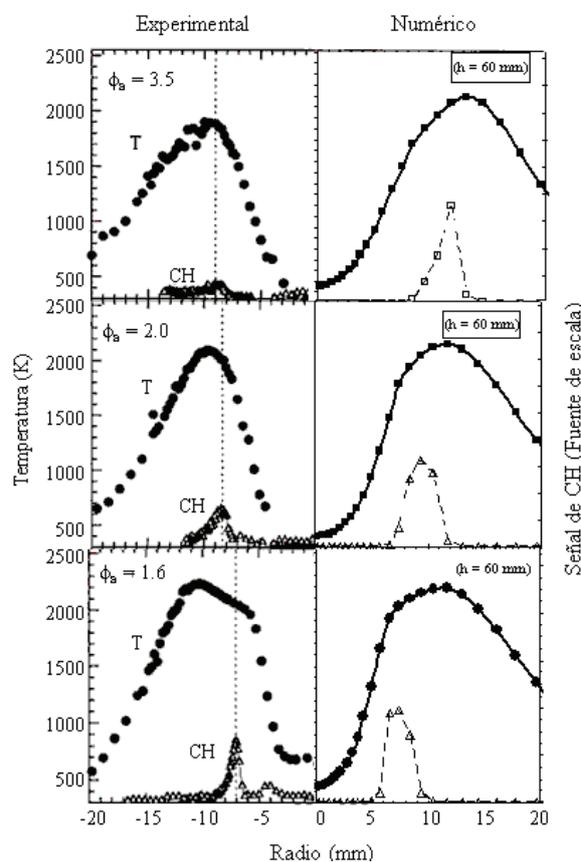


Figura 8 Efecto del dosado relativo sobre los perfiles radiales de temperatura y CH, ($z = 60$ mm).

Otro aspecto que evidencian los perfiles experimentales es el proceso de calentamiento de la premezcla, particularmente para $\Phi=1,6$. Para los resultados numéricos se observa que, a la altura estudiada, hay precalentamiento de la mezcla para todos los dosado relativos, sin embargo, no existe una correlación clara entre el dosado relativo y el valor de temperatura de precalentamiento.

Los perfiles de CH experimentales tienen una escala común pero arbitraria, lo cual solo permite hacer un análisis cualitativo de esta variable; experimentalmente se observa que a mayor dosado relativo menor presencia del radical CH. Se observa que el máximo del perfil se presenta en una zona próxima a la de combustión de premezcla. Los resultados numéricos corresponden a fracción molar pero se reportan sin escala numérica. Para $h = 60$ mm, el valor máximo tiende a permanecer constante al variar el dosado relativo, sin embargo la posición a la que se presenta la máxima fracción es próxima a la zona de combustión de premezcla, cuando esta se puede diferenciar de la zona de combustión por difusión. Al analizar el mecanismo reaccional *GRIMECH 3.0* [20] y el utilizado en este estudio se observa que el radical CH promueve la formación de CO y HCO y que estas dos últimas moléculas están en el origen de la formación de CO_2 . Una incorrecta predicción del radical CH afecta por tanto las concentraciones tanto de CO como CO_2 y en última instancia los valores de la temperatura. Experimentalmente se observa que, en $h = 60$ mm, al aumentar el dosado relativo, se reduce la concentración de CH lo cual inhibiría la formación de CO_2 . Esto explica la reducción de la temperatura con el aumento del dosado. Lo que se obtiene numéricamente es que las concentraciones de CH permanecen prácticamente constantes con el incremento del dosado. Luego de la explicación anterior se tiene que las concentraciones de CO_2 y la temperatura tienden también a permanecer constantes y esto es efectivamente lo que se obtiene en las simulaciones numéricas. No obstante el comportamiento de los resultados en $h = 60$ mm, la simulación numérica logra

captar las modificaciones en la estructura de la llama al incrementar el dosado relativo.

Altura de la llama

En este trabajo se calculó la altura de la llama de premezcla tomando como criterio el primer punto donde la fracción molar de OH comience a aumentar. Este criterio se basa en la cinética de reacción del radical OH. En el frente de llama las tasas de producción y destrucción del radical OH están en equilibrio y solo por fuera de este la tasa de producción es superior a la de destrucción por lo que su fracción molar comienza a aumentar [3]. Experimentalmente Najm *et al.* [21] reportaron que las especies HCO y CH_2O (formaldehído), permiten identificar el frente de llama. Sin embargo este criterio no se emplea para determinar la altura de la llama por cuanto no se observó una correlación directa entre el dosado relativo y la altura de la llama, mientras que con el criterio del aumento de OH se tiene que a mayor dosado relativo mayor altura de la llama de premezcla a potencia térmica constante. La diferencia entre las alturas de llama de acuerdo a los dos criterios se muestra en la tabla 3.

Tabla 3 Alturas de llama (H_f)

Φ	Altura de llama [mm]	
	H_{fOH}	H_{fCH_2O}
1,6	92	82
2,0	96	95
3,5	112	94

Efecto del dosado relativo sobre la estructura de llama

La figura 9 presenta los contornos de fracción molar de las especies; CH_4 , CO, CO_2 , OH, HCO, así como los de temperatura, de acuerdo al dosado relativo. Las imágenes se encuentran ordenadas de izquierda a derecha de la siguiente forma: $\Phi=1,6$, $\Phi=2,0$ y $\Phi=3,5$. Al comparar los contornos de temperatura figura 9 (a, b, c) se observa que los tres están compuestos por cuatro zonas; de adentro hacia

fuera son: una zona interna donde no se presentan incrementos sensibles, una segunda zona donde se presentan fuertes gradientes, una tercera en la que se alcanza el valor máximo y una cuarta zona en la que se presenta una disminución gradual. Las diferencias que se observan en función del dosado relativo están referidas a la extensión de cada una de estas zonas. Al comparar las figuras 9 (a) y 9 (b) se observa que al aumentar el dosado relativo aumenta el tamaño de la zona interior (de baja temperatura) y ligeramente la zona de alta temperatura, sin embargo, la figura 9 (c) ($\Phi=3,5$) muestra una zona interna más pequeña que la figura 9 (b) ($\Phi=2,0$) y la zona de aumento de temperatura, más extendida, es decir un gradiente menos fuerte comparado con la de ($\Phi=2,0$). Los contornos de CH_4 , figura 9 (d, e, f), muestran dos zonas; una zona donde no hay cambio de composición, asociada a la región de baja temperatura y una zona de fuerte gradiente donde se consume todo el combustible. En la figura 9 (e) ($\Phi=2,0$) la zona interna es la de mayor tamaño. En la figura 9 (f), ($\Phi=3,5$) la zona exterior se extiende en un espacio mayor, lo que se traduce en un proceso más gradual del consumo del combustible, si se compara con la zona externa de la figura 9 (d) ($\Phi=1,6$). De los contornos de temperatura y metano se concluye que al aumentar el dosado relativo existe un cambio gradual en el proceso de combustión, en el cual la combustión de premezcla ya no está tan bien delimitada.

Los contornos de CO, figura 9 (g, h, i), muestran 4 regiones; la interior, con ausencia de esta especie, una región de formación con altos gradientes, una tercera donde se alcanza y mantiene el valor máximo y una cuarta de disminución también con fuertes gradientes. En la figura 9 (g) ($\Phi=1,6$) la región de formación de CO es estrecha, mientras la de destrucción es más ancha y la región de máxima presencia de CO es la más pequeña de las tres. En la figura 9 (i) ($\Phi=3,5$), la zona de formación es ancha, mientras la de destrucción es estrecha y la región de máxima presencia es la más ancha en comparación a los otros dosados relativos. Se observa que a medida que aumenta el dosado relativo el tamaño de la zona con presencia de CO incrementa. Lo anterior se in-

terpreta como señal de que el proceso de difusión gana importancia con el aumento en el dosado relativo. Los contornos de CO_2 , figura 9 (j, k, l), guardan similitud con los de temperatura, lo cual se esperaba, por cuanto los mayores portadores de la energía liberada durante el proceso de combustión son los productos estables en este caso el CO_2 y el H_2O . Los contornos de CO y CO_2 están relacionados debido a que la oxidación del CO da lugar a CO_2 . Esto se evidencia para todos los dosados relativos, al obtenerse la mayor fracción molar de CO_2 en la región adyacente a la de desaparición de CO. Esto evidencia que el proceso de simulación no reproduce la degradación de la combustión con el aumento del dosado, reportado experimentalmente. En la figura 9 (m, n, o) se muestran los contornos de OH. Éstos tienen en común que se forman en una región externa a la llama de premezcla, esto se explica teniendo en cuenta que los radicales OH reaccionan rápidamente con los combustibles (CH_4 , H_2 , C_2H_2) y su tasa de destrucción iguala la de formación. Solamente en la región de la combustión por difusión ocurre lo contrario. Estos perfiles permiten observar que a medida que el dosado relativo se incrementa la región con combustión de premezcla se presenta a alturas mayores. Sin embargo, la importancia de la combustión por difusión será mayor a medida que aumente el dosado relativo, alterando el proceso que se sigue para la oxidación del combustible. Finalmente, se muestran los contornos de HCO, figura 9 (p, q, r) por cuanto se considera que esta especie revela de manera bastante aproximada el frente de llama. En este estudio, la tendencia se observó que al aumentar el dosado relativo la altura de los contornos de HCO aumentaba para los dosados relativos 1,6 y 2,0. Sin embargo la comparación entre los dosados relativos 2,0 y 3,5 no muestra dicha tendencia. Al observar con atención la figura 9 (r) ($\Phi=3,5$) se encuentra que la forma del contorno presenta diferencias con las figuras 9 (p, q) ($\Phi=1,6$) ($\Phi=2,0$). Esto puede significar que el proceso de simulación tiene un límite en la reproducción del fenómeno conforme el dosado relativo aumenta, como consecuencia de la utilización de un mecanismo reducido.

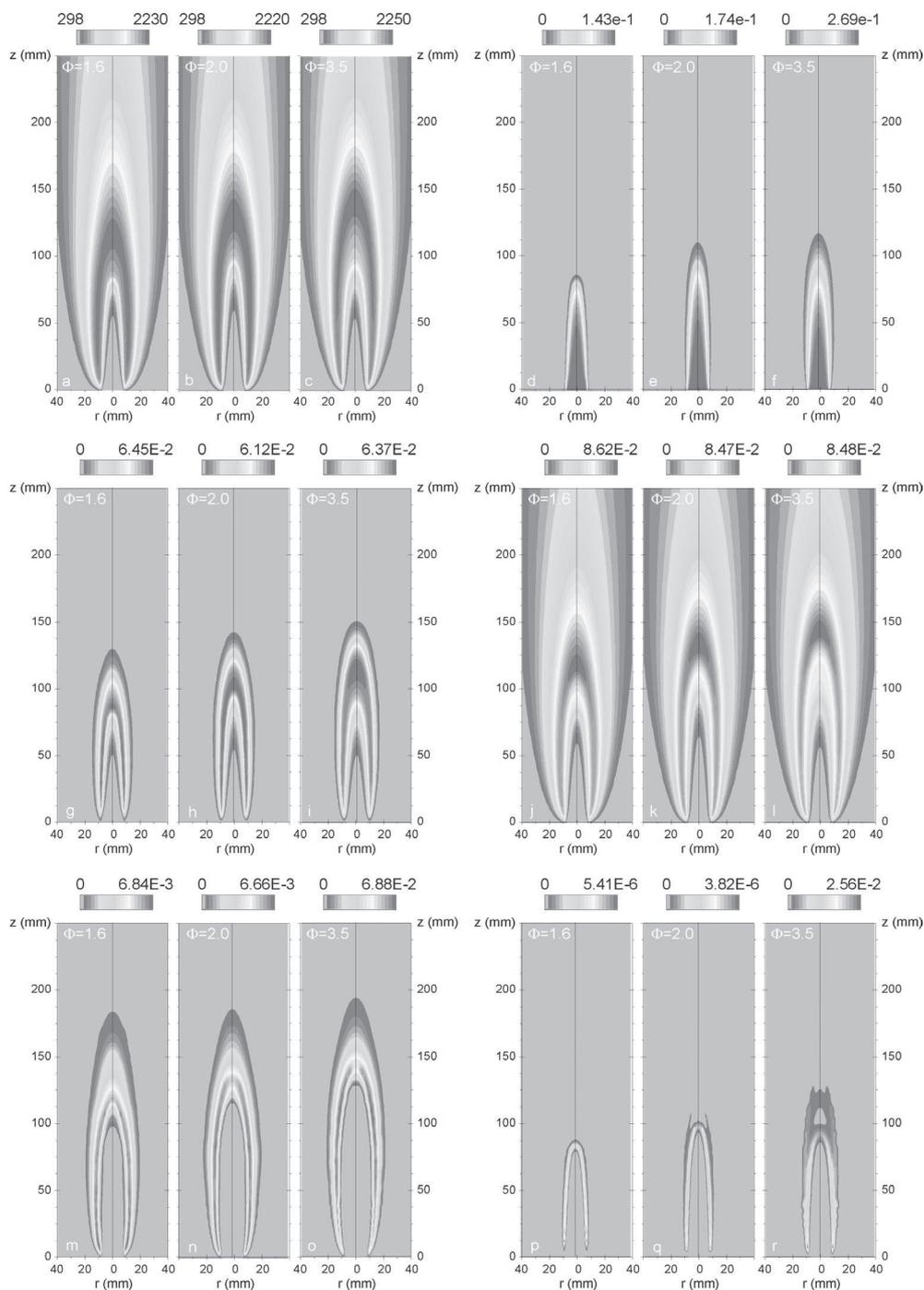


Figura 9 Contornos de temperatura y especies en función del dosado relativo. Cada grupo está compuesto por tres imágenes, correspondientes a los dosado relativos: de izquierda a derecha 1,6, 2,0, 3,5. (a-c) temperatura (K), (d-f) fracción molar de CH_4 , (g-i) fracción molar de CO , (j-l) fracción molar de CO_2 , (m-o) fracción molar de OH y (p-r) fracción molar de HCO . (Escala vertical en [mm])

Conclusiones

El proceso de simulación de una llama de premezcla parcial variando el dosado relativo entre 1,6 y 3,5 empleando el código *CFD FLUENT V 6.2* permitió: Obtener resultados aceptables al comparar los perfiles radiales de temperatura y velocidad simulados con los reportados experimentalmente. Economizar tiempo de cálculo en la solución del problema al emplear un modelo de flujo turbulento combinado con una baja densidad de mallas en la zona de reacción, con resultados satisfactorios. Reproducir las tendencias reportadas, por trabajos numéricos y experimentales, en cuanto a la altura de la llama interna. Validar el proceso de simulación para el estudio del efecto del dosado relativo sobre la estructura de llamas de premezcla parcial. Para obtener resultados más cercanos a la realidad al momento de simular el efecto del dosado sobre el proceso de combustión se recomienda, emplear mecanismos cinéticos más detallados e incluir el efecto de la radiación.

Agradecimientos

Los autores agradecen al grupo GASURE y a la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Antioquia por financiar la compra de la licencia del código *CFD*.

Nomenclatura

h: distancia axial desde el puerto del quemador al punto de comparación [mm]
 H_f : altura de llama [mm]
 T: Temperatura [K]
 U: Velocidad axial [m/s]
 r_0 : Radio del puerto del quemador
 R_2 : Radio externo del dominio de la simulación

Letras griegas

Φ : dosado relativo, definido como la relación existente entre la (masa de aire primario)/(masa de combustible) estequiométrica sobre la (masa de aire primario)/(masa de combustible) actual.
 ρ_M : Densidad del mallado, esto es, número de mallas por unidad de área.

Abreviaturas

AP: Aire primario
 AS: Aire secundario

Subíndices

A: Alrededores
 f: combustible
 ZC: Zona de combustión

Referencias

1. A. Amell. "Estimación de las propiedades de combustión de combustibles gaseosos". 1ª ed. Centro de Extensión Académica – CESET, *Universidad de Antioquia*. 2002. pp. 1-72.
2. J. P. Gore, N. J. Zhan. "NO_x emissions and major species concentrations in partially premixed laminar methane / air co-flow jet flame". *Combust. Flame*. Vol. 105. 1996. pp. 414-427.
3. Q. V. Nguyen, R. W. Dibble, C. D. Carter, G. J. Fiechtner, R. S. Barlow. "Raman-LIF measurements of temperature, major species OH, and NO in a Methane-Air Bunsen Flame". *Combust. Flame*. Vol. 105. 1996. pp. 499-510.
4. L. G. Blevins, M. W. Renfro, K. H. Lyle, N. M. Lauendeau, J. P. Gore. "Experimental study of temperature and CH radical location in partially premixed CH₄/Air coflow flames". *Combust. Flame*. Vol. 118. 1999. pp. 684-696.
5. B. V. Bennett, C. S. Mcenally, L. D. Pfefferle M. D. Smooke. "Computational and experimental study of axisymmetric coflow partially premixed methane/air flames". *Combust. Flame*. Vol. 123. 2000. pp. 522-546.
6. K. Claramunt, R. Cònsul C. D. Pérez-Segarra, A. Oliva. "Multidimensional mathematical modeling and numerical investigation of co-flow premixed methane/air laminar flame". *Combust. Flame*. Vol. 137. 2004. pp. 444-457.
7. X. Zhou, G. Brenner, T. Weber, F. Durst. "Finite rate chemistry in modeling of two-dimensional jet premixed CH₄/air flame". *Inter. J. Heat Mass Transfer*. Vol. 42. 1999. pp. 1757-1773.
8. C. S. Mcenally L. D. Pfefferle, "Experimental study of nonfuel hydrocarbon concentrations in coflowing partially premixed methane/air flames". *Combust. Flame* Vol. 118. 1999. pp. 619-632.

9. M. D. Smooke, C. S. Mcenally, L. D. Pfefferle, R. J. Hall, M. B. Colket. "Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame". *Combust. Flame* Vol. 117. 1999. pp. 117-139.
10. I. Glassman. *Combustion*. 3ª ed. Academic Press. New York. 1996. pp. 107-156.
11. K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. 1ª ed. Jhon Wiley & Sons. New York 1986. pp. 285-328.
12. Using the Solver. *Fluent User guide V. 6.2*. FLUENT INC 2005, Capitulo 26. pp. 1-141.
13. PREMIX *User guide*. Sandia Report SAND85-8240. Sandia National Laboratories. Livermore. CA, 1985. pp. 1-87.
14. Modeling species transport and finite rate chemistry. *Fluent User guide V. 6.2*. FLUENT INC 2005, Capitulo 14. pp: 1-64
15. The Composition PDF Transport Model. *Fluent User guide V. 6.2*. FLUENT INC 2005, Capitulo 18. pp. 1-20
16. C. P. Chou, J. Y. Chen, C. G. Yam, K. D. Marx. "Numerical modeling of NO formation in laminar Bunsen flames-A flamelet approach". *Combust. Flame*. Vol. 114. 1998. pp. 420-435.
17. B. V. Bennett, M. D. Smooke. "Local rectangular refinement with application to axisymmetric laminar flame". *Combust. Theo. Model*. Vol. 2. 1998. pp. 221-258.
18. A. Feugier, F. Bouc, L. Mauss, G. Monnot. *Principles of turbulent fired heat*. 1ra Ed., Éditions Technip, Publications de L'institut Francaise du Petrole. France. 1985. pp. 48-75
19. S. R. Turns. *An introduction to combustion, Concepts and Applications*. 2ª ed. McGraw Hill, Singapur. 2000. pp. 253-304.
20. G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklanch, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldemberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, V. V. Lissianski and Z. Qin, G. Mech. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/. Consultada Mayo 25 de 2006.
21. H. B. Najm, P. H. Paul, C. J. Mueller, P. S. Wyckoff. On the adequacy of certain experimental observables and measurements of flame burning rate. *Combust. Flame* Vol. 113. 1998 pp, 312-332.