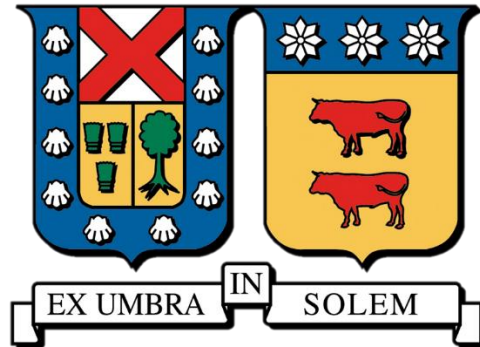


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO - CHILE



Investigación y desarrollo de un quemador divergente de
medio poroso inerte para la combustión de la premezcla
propano-aire

NELSON SEBASTIÁN ARAYA MEZA

Tesis de grado para optar al grado de:

Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica

Y al título de:

Ingeniero Civil Mecánico

Profesor Guía: Dr. Mario Toledo Torres

Profesor correferente: Dr. Rodrigo Barraza

Profesor correferente externo: Dr. Wolfram Jahn

Enero 2024

TITULO DE LA TESIS:

**INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO DE UN QUEMADOR DIVERGENTE DE MEDIO
POROSO INERTE PARA LA COMBUSTIÓN DE LA PREMEZCLA PROPANO**

AUTOR:

Nelson Sebastián Araya Meza

TRABAJO DE TESIS, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el Grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Dr. Ing. Mario Toledo Torres

Dr. Rodrigo Barraza

Dr. Wolfram Jahn

VALPARAÍSO, CHILE - 2024

Agradecimientos

Agradezco en primer lugar a mis padres, ya que durante mi etapa de estudios nunca me faltó la comida, abrigo, un techo y lo más importante: el amor. A mis hermanas, que siempre están cuando lo necesito y me brindan apoyo incondicional. A todo el resto de mi familia que siempre se preocupa por mí.

A Ornella, que me hace disfrutar de la vida brindándome amor, risas y compañía desde el 2016. Eres lo mejor que me ha pasado.

A mis amigos de la universidad “Ernestos”, con los cuales los buenos momentos y distracciones nunca acaban. En especial a Nicolás Carmona y Rodrigo Valdés, son una fuente de apoyo incondicional y sin ellos, mi vida hoy no sería la que es.

A “Mountainbrothers” mi familia endurera con los cuales un día en el cerro siempre será un día bueno.

A mis seres queridos, humanos y mascotas, que partieron a una vida mejor durante mi estadía en la universidad.

Finalmente, muchas gracias a mi profesor guía Mario Toledo por tenerme paciencia y siempre estar preocupado de mi trabajo.

Resumen

La combustión de llamas premezcladas en medios porosos inertes se ha catalogado como una opción muy eficiente al momento de quemar mezclas de bajo poder calorífico, con baja tasa de emisiones contaminantes y con amplia modulación de potencia, además de otras ventajas comparado con la combustión de llama libre. Uno de los problemas que enfrenta esta tecnología es el movimiento del frente de combustión al interior del reactor ya sea aguas abajo o arriba del flujo, lo cual puede ocasionar inestabilidades, un desplazamiento fuera del medio poroso o bien, hacia las líneas de ingreso de premezcla, lo que se conoce como blowout y flashback, respectivamente. El presente trabajo de tesis investiga numérica y experimentalmente la técnica de estabilización del frente de combustión conocida como convectiva o variación de área transversal, la cual tiene como base la ley de conservación de masa, buscando que la velocidad de entrada de premezcla se equipare a la velocidad de quemado del combustible. El estudio se realiza mediante tres reactores de medio poroso de esferas de alúmina de 0° , 15° y 30° de divergencia, alimentados por mezclas de aire y propano. Para la contraparte numérica se desarrollan modelos 2D transientes basados en el método de diferencias finitas que resuelven la fluidodinámica, temperaturas del sólido y gas, respectivamente, y conservación de especie química. Se simularon los efectos que tiene la variación de la relación de equivalencia, la velocidad de filtración a la entrada y el ángulo de divergencia sobre la temperatura, posición, velocidad y geometría del frente de combustión. Además, se analiza el comportamiento de los gases producto.

Los resultados arrojaron comportamientos no informados antes en la literatura existente sobre este tipo de reactores. En comparación con un reactor de paredes rectas o cilíndrico en donde la geometría de la llama es normalmente plana, se comprobó tanto experimental como numéricamente que ésta llama es cóncava en un reactor de paredes inclinadas, curvatura que además está influenciada por la magnitud de la velocidad de filtración y la velocidad de avance de la llama. La temperatura del frente de combustión no es constante dentro de un reactor divergente, ya que de acuerdo con su ubicación puede aumentar o disminuir, es más, para el reactor de 30° con 0.90 m/s de velocidad a la entrada se percibió un aumento de 86% de lo registrado desde la zona de ignición hasta la de ingreso de mezcla, esto es, 950 K hasta 1765 K . Por otro lado, la velocidad de avance aguas arriba de la llama aumenta constantemente, por lo que se tiene una llama acelerada, si bien el comportamiento hallado numéricamente es el correcto, se encuentra una gran desviación para la velocidad al alcanzar la entrada del reactor. Este fenómeno aumenta grandemente el riesgo de flashback, por lo cual es imperativo usar una trampa de llama. En cuanto al rango de operación, se pudo comprobar que al aumentar el ángulo de divergencia se admiten velocidades de entrada mayores, y, por ende, se puede operar con potencias mayores. Al contrario que los reactores cilíndricos, los divergentes tienen más de un punto de operación para la relación de equivalencia con llama estacionaria. Para una velocidad de 0.63 m/s , experimentalmente se hallaron 3 puntos estacionarios, mientras que numéricamente 2, y para una velocidad de 0.90 m/s experimentalmente se hallaron 2 puntos y numéricamente también, pero con desviaciones en la ubicación y, por ende, temperatura de la llama. El tiempo de combustión estacionaria para las llamas halladas en el reactor de 15° no fue comparable con los tiempos experimentales. Respecto a los gases productos, el

tiempo de residencia dentro de los reactores divergentes es mucho mayor llegando para las mismas condiciones de operación al orden de los ~500 milisegundos en comparación con el cilíndrico, que para el caso estudiado no supera los 50 milisegundos. Esto significa una gran ventaja al momento de este tipo de reactores para usarse en procesos de reformado u oxidación parcial. Además, se halla que el régimen de la fase gaseosa es mayoritariamente laminar, sobre todo en los reactores divergentes.

Palabras clave: *Medio poroso inerte divergente, Ángulo de divergencia, Frente de combustión, Estabilización, Tiempo de residencia, Velocidad del frente de combustión, Relación de equivalencia.*

Abstract

Premixed combustion in inert porous media (IPM) is a combustion method characterized for being able to burn low calorific mixtures as it is a very efficient technique with various advantages over free flame burning. One of the main problems of this technology is the displacement of the flame front inside the porous medium whether it is upstream or downstream, causing blowout or flashback into the fuel supply lines. The present work investigates experimentally and numerically the flame front stabilization technique known as convective or cross section variation, which is based on the mass conservation law, implying that the flow velocity of fresh mixture is matched by the burning velocity of the fuel at some point inside the IPM. The study is carried out by testing three alumina packed bed IPM burners, with divergence angles of 0° , 15° and 30° , fed by propane-air lean mixtures. For the numeric counterpart, transient 2D models are developed based on the finite difference method, which solve fluid dynamics, temperature of the solid and gas phase, and species conservation. The effect of equivalence ratio, inlet velocity and divergence angle on temperature, flame location, velocity and geometry were investigated as well as the behavior of combustion product gases.

Results showed novel phenomena regarding divergent IPM burners. In comparison to a straight wall reactor, where flame has a flat shape, it was evidenced experimentally and numerically that in an inclined wall reactor this shape is concave or curved and is affected by the magnitude of the inlet velocity and flame displacement velocity. Moreover, peak temperature is not constant inside the burner, since it tends to constantly increase while the front displaces upstream, as an example, the 30° reactor with an inlet velocity of 0.90 m/s had an increase in 86% starting from what was registered at the ignition zone i.e., 950 K up to 1765 K. On the other hand, upstream displacement velocity increases significantly, thus, the flame accelerates towards the inlet, meaning a growing danger of flashback. This leads to the conclusion that a well-designed flame trap is imperative. Numerically, the values predicted for flame front velocity show deviations especially at the inlet zone. It was proven that increasing the divergence angle positively affects the maximum admissible inlet velocity without the flame to displace outside the reactor, thus, having the capacity to operate with greater power. Contrary to straight wall reactors, divergent ones have the property of having more than one operating point for which stationary flame fronts are achieved. For a velocity of 0.63 m/s in the 15° reactor, three experimental and two numerical stationary flames were found, meanwhile, for the 30° reactor with an inlet velocity of 0.90 m/s, two experimental and numerical ones were found. The positions of the predicted flame fronts present deviations in location and thus, temperature, also, stationary combustion regime time for the 15° burner is limited and non-comparable to experimental measurements. Regarding the combustion products, it is found that residence time inside the post-combustion zone inside the burners augments drastically with the increase in divergence angle, moreover, for equal operation conditions, the 30° burner reached residence times in the order of ~ 500 milliseconds while the cylindrical burner did not surpass 50 milliseconds. This shows the potential of this technique to be used for partial oxidation or hydrocarbon reforming.

Keywords: *Stationary combustion, Divergent inert porous media, Divergence angle, Flame front velocity, Equivalence Ratio, Residence time.*

Índice

Agradecimientos	I
Resumen.....	II
Abstract	IV
Índice de Figuras	VIII
Índice de Tablas	XII
Nomenclatura	XIII
1 Introducción y objetivos.....	1
1.1 Introducción.....	1
1.2 Objetivos.....	4
1.3 Estructura de la tesis	4
2 Marco Teórico y Revisión bibliográfica	5
2.1 Combustión en MPI.....	5
2.1.1 Materiales	8
2.2 Combustión Transiente vs Estacionaria.....	9
2.2.1 El Número de Pécelet.....	10
2.2.2 Velocidad de Llama Laminar	11
2.3 Flashback y Blowout	12
2.4 Estabilización del frente de combustión en CMPI.....	14
2.4.1 Ventajas de la Estabilización en CMPI	14
2.4.2 Técnicas de Estabilización del frente de combustión en CMPI	14
2.5 Reactor de Medio Poroso Divergente.....	16
2.5.1 Teoría.....	16

2.5.2	Estado del arte	17
3	Desarrollo del Modelo Matemático y Metodología Experimental.....	22
3.1	Modelación matemática.....	22
3.1.1	Ecuaciones gobernantes.....	22
3.2	Resolución numérica.....	27
3.2.1	Mallado.....	27
3.2.2	Discretización de ecuaciones gobernantes	30
3.3	Metodología Experimental	58
4	Resultados y discusión	61
4.1	Reactor cilíndrico.....	61
4.2	Reactores divergentes	69
4.3	Gases Producto	86
4.4	Comentarios.....	91
5	Conclusiones	93
	Referencias.....	97
	Apéndice A.....	102
	A.1 Método ADI	102
	A.2 Algoritmo de Thomas.....	103

Índice de Figuras

Figura 1.1: Emisiones anuales de CO ₂ asociadas a combustibles fósiles por región. Fuente: Our World in Data.	1
Figura 1.2: Mecanismos de transferencia de calor al interior de un medio poroso.....	2
Figura 1.3: Método de estabilización convectivo.	3
Figura 2.1: Llama de difusión (izquierda), llama premezclada (derecha).	5
Figura 2.2: Representación de las zonas existentes en la combustión de MPI.	7
Figura 2.3: Recirculación de calor en un quemador de MPI [14].....	7
Figura 2.4: Estructuras porosas cerámicas. a) esferas, b) honeycomb, c) laminar, d) esponja.	8
Figura 2.5: Velocidad de llama laminar en función de la relación de equivalencia para mezclas propano-aire para diferentes temperaturas de precalentamiento [25].	12
Figura 2.6: Representación gráfica del flashback.	13
Figura 2.7: Frente de combustión en CMPI y llama libre [29].	13
Figura 2.8: Técnicas de estabilización en CMPI [21].	15
Figura 2.9: Estructura de un reactor de medio poroso divergente [6] y definición del ángulo de divergencia.	17
Figura 2.10: Límite de blowout relativo a la mezcla aire combustible en función de la potencia para distintas temperaturas de precalentamiento. Resultados del trabajo de Bakry et al. [7].	18
Figura 2.11: Ppm de NO _x medidos a diferentes relaciones de aire para distintas potencias. Bakry et al. [32].	18
Figura 2.12: Reactor usado en el trabajo de Voss et al. [33].	19
Figura 2.13: Influencia del ángulo de divergencia (2θ) en la velocidad máxima admisible del flujo antes del blow-out [8].	20
Figura 2.14: Límite de flamabilidad para reactor divergente y reactor recto Qian et al. [10].	21
Figura 2.15: Izquierda: Temperatura máxima y fracción molar de hidrógeno alcanzada para una relación de equivalencia de 2 para variados ángulos de divergencia. Derecha: Límites de operación entre ángulos de divergencia 0° y 45°	21

Figura 3.1: Ejes coordenados cilíndricos.	27
Figura 3.2: Notación de discretización en diferencias finitas.	28
Figura 3.3: Malla en dominio cilíndrico.	28
Figura 3.4: Malla en dominio divergente.	29
Figura 3.5: Ilustración de construcción de espaciado radial.	29
Figura 3.6: Esquema del reactor de medio poroso cilíndrico empleado.	58
Figura 3.7: Esquema representativo del reactor de medio poroso divergente de 15° de divergencia.	59
Figura 3.8: Esquema representativo del reactor de medio poroso divergente de 30° de divergencia.	59
Figura 3.9: Reactores de medio poroso cilíndrico (izquierda) y con ángulo de divergencia de 15° (centro) y 30° (derecha).	60
Figura 4.1: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.3 y 0.4, reactor de 0°, velocidad de filtración 0.35 m/s.	61
Figura 4.2: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.5 y 0.7, reactor 0°, velocidad de filtración 0.35 m/s.	62
Figura 4.3: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.8, reactor 0°, velocidad de filtración 0.35 m/s.	62
Figura 4.4: Resultados verificación de independencia de malla.	63
Figura 4.5: Con $u_0 = 0.35$ m/s y $\varphi = 0.7$ en reactor cilíndrico, a) Comparación numérica y experimental de la temperatura sobre el eje axial. b) Fracción másica de las especies a lo largo del eje axial.	63
Figura 4.6: Para reactor cilíndrico y $u_0 = 0.35$ m/s: a) Velocidad del frente de combustión predicha y experimental, b) Temperatura de llama adiabática, temperatura máxima promedio predicha y experimental.	64
Figura 4.7: Llama de 0.7, 30 minutos luego de ignición en $z = 12.5$ cm, $u_0 = 0.35$ m/s en reactor cilíndrico, campos de a) Temperatura del sólido, b) temperatura del gas, c) Fracción másica de propano, d) campo vectorial de velocidades.	65
Figura 4.8: Efecto de la relación de equivalencia en campos de temperatura de la fase sólida luego de 10 minutos de ignición al centro del reactor.	66

Figura 4.9: a) Frente de combustión para llamas de $\varphi = 0.4$ y 0.8 , 10 minutos después de la ignición, b) Evolución temporal del frente de combustión y ubicación de la temperatura máxima del sólido para llama de $\varphi = 0.7$.	67
Figura 4.10: Efecto de la velocidad de entrada en campos de temperatura y velocidad del frente de combustión luego de 15 minutos de la ignición al centro del reactor.	68
Figura 4.11: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.3 y 0.4 , reactor 15° , velocidad de filtración 0.63 m/s.	69
Figura 4.12: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.5 y 0.6 , reactor 15° , velocidad de filtración 0.63 m/s.	69
Figura 4.13: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.8 , reactor 15° , velocidad de filtración 0.63 m/s.	70
Figura 4.14: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.5 , reactor 15° , con velocidad de filtración 0.60 m/s.	¡Error! Marcador no definido.
Figura 4.15: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.4 , 0.5 y 0.6 , reactor 30° , velocidad de filtración 0.90 m/s.	70
Figura 4.16: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.7 , reactor 30° , velocidad de filtración 0.90 m/s.	71
Figura 4.17: Visualización de perfiles de termocuplas para reactor de 0° y divergente (15°).	72
Figura 4.18: Comprobación de independencia de malla de modelos divergentes, 10 minutos luego de ignición en la mitad del reactor.	72
Figura 4.19: Temperatura de fases sólida y gaseosa en función de la cantidad de nodos, 10 minutos luego de ignición en la mitad del reactor.	73
Figura 4.20: Temperatura máxima y desplazamiento del frente de combustión en reactor divergente de 30° , $\varphi = 1$.	73
Figura 4.21: Temperatura máxima y desplazamiento del frente de combustión en reactor divergente de 15° , $\varphi = 1$.	74
Figura 4.22: Para reactor de 30° y $\varphi = 0.9$ luego de 36 minutos de ignición, campos de a) Temperatura del sólido b) Temperatura del gas.	75
Figura 4.23: Para reactor de 30° y $\varphi = 0.9$ luego de 36 minutos de ignición, campos de a) Fracción másica de propano b) Velocidad.	75

Figura 4.24: Para reactor de 15° y $\varphi = 1$ luego de 40 minutos de ignición, campos de a) Temperatura del sólido b) Temperatura del gas.....	76
Figura 4.25: Para reactor de 15° y $\varphi = 1$ luego de 40 minutos de ignición, campos de a) Fracción másica de propano b) Velocidad.....	76
Figura 4.26: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 1, reactor 30° y visualización bidimensional de la diferencia de temperatura radial.....	77
Figura 4.27: Para reactor de 30° : a) Visualización bidimensional numérica de campo de temperatura del sólido, b) Temperatura del sólido numérica en $z = 63$ mm, en rojo, las posiciones experimentales de T2, T5 y T5'.....	78
Figura 4.28: Desarrollo temporal del perfil de combustión a través de reactores divergentes, llamas con $u_0 = 0.7$ m/s, $\varphi = 1$	79
Figura 4.29: Comportamiento de la temperatura y velocidad del frente de combustión a lo largo de reactores divergentes, $u_0 = 0.7$ m/s, $\varphi = 1$	80
Figura 4.30: Temperaturas en plano de ubicación del frente de combustión y visualización bidimensional de campo de temperatura del sólido.....	80
Figura 4.31: Variación de la potencia térmica de reactores por unidad de área en eje z, con $\varphi = 0.8$	81
Figura 4.32: Variación de la posición de la llama y distribución de temperatura dentro de reactor de 15° para distintas velocidades de ingreso de mezcla.....	81
Figura 4.33: Límites de flamabilidad para reactores, con llama $\varphi = 1$, ignición en porción superior del reactor.....	82
Figura 4.34: Interpretación de flashback y blowout en reactor divergente.....	83
Figura 4.35: Velocidades de frente de combustión experimental y numérico para reactor de 15° ..	83
Figura 4.36: Velocidad del frente de combustión en función de la relación de equivalencia para los reactores divergentes a lo largo del eje axial, izquierda experimental, derecha numérica.....	84
Figura 4.37: Posiciones de frentes de combustión estacionarios dentro de reactores divergentes de: a) 15° con $u_0 = 0.63$ m/s, b) 30° con $u_0 = 0.90$ m/s, para variadas relaciones de equivalencia.	85
Figura 4.38: Frente de combustión estabilizado para reactor de 30° con $\varphi = 0.5$ y 0.6	85
Figura 4.39: Campos de fracción másica de O2 con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$. De izquierda a derecha: 0° , 15° , 30°	86

Figura 4.40: Campos de fracción másica de H ₂ O, con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$. De izquierda a derecha: 0°, 15°, 30°.	87
Figura 4.41: Campos de fracción másica de CO ₂ , con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$. De izquierda a derecha: 0°, 15°, 30°.	87
Figura 4.42: Magnitud de velocidad de fase gaseosa sobre eje central para reactores cilíndrico y divergentes, máximos ubicados en $z = 100$ mm y $z = 150$ mm con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$.	88
Figura 4.43: Campos vectoriales y de magnitud de velocidad del gas para reactores con ubicación de máximos en $z = 100$ mm, con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$.	88
Figura 4.44: Número de Reynolds a lo largo del eje central para cada reactor con llama en posiciones $z = 100$ mm y 150 mm, $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$.	90
Figura 4.45: Límite experimental de flamabilidad inferior de reactores divergentes respecto de la velocidad de flujo entrante.	91
Figura 4.46: Comparación de velocidades de frente de combustión entre reactores, experimental para $\varphi = 1$.	92
Figura 5.1: a) Diseño de reactor divergente con sección cilíndrica llena de esferas de menor tamaño a matriz divergente b) Diseño de reactor divergente con sección de esferas de menor tamaño.	95

Índice de Tablas

Tabla 2.1: Regímenes de velocidad en combustión [22].	10
Tabla 2.2: Velocidad de llama laminar para distintos combustibles, quemados con aire $\varphi = 1$, 1 atm y temperatura ambiente [12].	12
Tabla 3: Características de las llamas estudiadas y tiempo de residencia de gases producto.	89

Nomenclatura

Símbolos griegos

α : Coeficiente de difusividad térmica (m^2/s)

Δ : Diferencial/diferencia

ε : Emisividad de las esferas de alumina (-)

θ : Ángulo de divergencia ($^\circ$)

λ_s : Conductividad térmica (W/mK)

λ_{eff} : Conductividad efectiva del medio poroso (W/mK)

μ : Viscosidad dinámica ($Pa \cdot s$)

ν'_k : Coeficiente estequiométrico (Reactantes)

ν''_k : Coeficiente estequiométrico (Productos)

ρ : Densidad (kg/m^3)

σ : Constante de Stefan-Boltzmann (W/m^2K^4)

Φ : Porosidad (-)

φ : Relación combustible-aire o relación de equivalencia (-)

Ψ : Función corriente (m^2/s)

$\dot{\omega}$: Tasa de reacción del combustible ($kmol/m^3s$)

Símbolos latinos

A_0 : Factor pre exponencial ($1/s$)

(A/F) : Relación aire combustible (-).

b : factor exponencial de la temperatura (-)

C_p : Calor específico (J/kgK)

C : Coeficiente de resistencia inercial ($1/m$)

d_p : Diámetro de partícula (m)

D : Coeficiente de difusión de la especie (m^2/s)

E_a : Energía de activación (J/mol)

h_v : Coeficiente de transferencia de calor convectivo (W/m^2K)

H_c : Entalpía de combustión (J/kg)

R_u : Constante universal de los gases ($J/mol \cdot K$)

R_p : Factor de caída de presión

Re_p : Número de Reynolds basado en diámetro de partícula (cama empacada)

r : Eje radial

St : Número de Strouhal

t : Tiempo (s)

T_s : Temperatura del medio sólido (K)

T_g : Temperatura del gas (K)

\vec{u} : Vector velocidad del gas (m/s)

u_r : Velocidad radial del gas (m/s)

k_0 : Permeabilidad (m^2)
 K : Coeficiente de resistencia viscosa (m^2)
 L : Largo del reactor (m)
 Le : Número de Lewis ($-$)
 N_s : Número total de especies químicas
 Nu : Número de Nusselt ($-$)
 P : Presión (Pa)
 P_{atm} : Presión atmosférica (Pa)
 Pe : Número de Péclet ($-$)
 Pr : Número de Prandtl ($-$)
 r : Eje radial
 R_1 : Radio de entrada del reactor divergente (m)
 R_2 : Radio de salida del reactor divergente (m)

Subíndices

s : sólido
 g : gas
 f : fluido
 r : radial
 x : contenido de átomos de Carbono
 y : contenido de átomos de Hidrógeno
 z : axial

u_z : Velocidad axial del gas (m/s)
 u_0 : Velocidad a la entrada de la premezcla (m/s)
 u_f : Velocidad del frente de combustión (m/s)
 V_{poro} : Volumen de poros (m^3)
 V_t : Volumen total (m^3).
 \bar{W} : Masa molar de la mezcla ($kg/kmol$)
 W_k : Masa molar de la especie k ($kg/kmol$)
 Y_k : Fracción másica de la especie química k ($-$)
 Y_{k0} : Fracción másica inicial de la especie química k ($-$)
 z : Eje axial
 $[]_k$: Concentración molar de la especie k ($kmol/m^3$)

Abreviaciones

MPI: Medio Poroso Inerte
 CMPI: Combustión en Medios Porosos Inertes
 ADI: Alternating Direction Implicit
 TDMA: Tridiagonal matrix algorithm
 CFD: Computational Fluid Dynamics (Dinámica de Fluidos Computacional)

Capítulo 1:

1 Introducción y objetivos

1.1 Introducción

Los combustibles y su uso excesivo en la industria del transporte, energía entre otras aplicaciones se ha visto como un agente permanente en la sustentación económica y social. Las emisiones derivadas del uso de los hidrocarburos, así como de otras fuentes de energía, tales como el carbón, madera y biomasa han logrado afectar el equilibrio térmico de la atmósfera terrestre en un proceso conocido como cambio climático y efecto invernadero. Hoy en día las empresas de producción han tomado medidas para aminorar el impacto de sus emisiones, así como los gobiernos han adoptado políticas y participado en acuerdos internacionales para reducir el daño al planeta a causa de la actividad humana. De acuerdo con Global Carbon Project, para el año 2020, la cantidad de CO_2 emitido por el uso de combustibles fósiles, supera las 35 billones de toneladas (**Figura 1.1**).

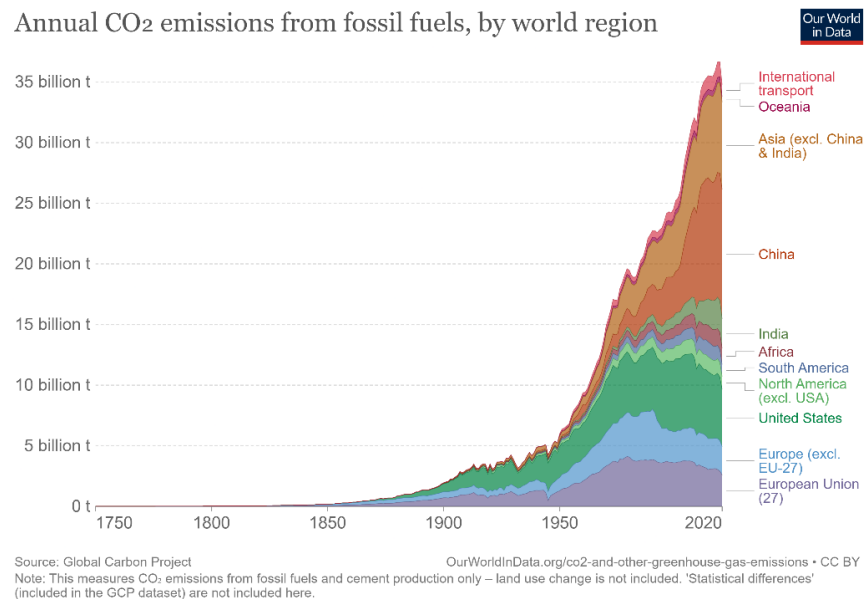


Figura 1.1: Emisiones anuales de CO₂ asociadas a combustibles fósiles por región. Fuente: Our World in Data.

Claramente estas emisiones son intrínsecas al uso de combustibles, sobre eso no existe discusión, pero de igual manera, se emiten otros gases de efecto invernadero (H_2O , CH_4 , N_2O , O_3), contaminantes altamente dañinos, tales como los NO_x , SO_x , CO y otros hidrocarburos no quemados.

Es importante hacer hincapié en el impacto que tienen, especialmente, los óxidos de nitrógeno NO_x . De esta familia de gases (en total siete) destacan principalmente el ácido nítrico NO y el dióxido de nitrógeno NO_2 . Este último, además de ser tóxico, es responsable de la formación de la lluvia ácida, material particulado $PM_{2.5}$ y smog fotoquímico debido a la formación de ozono y la interacción con compuestos orgánicos volátiles (COV) que corresponden a hidrocarburos no quemados [1]. Los NO_x son formados en procesos de combustión a altas temperaturas, como el mecanismo Zel'dovich [2], interacción de hidrocarburos, moléculas de nitrógeno y oxígeno a alta temperatura (fuera del mecanismo Zel'dovich) o por presencia de nitrógeno ligado al combustible. Es entonces que la producción de estas especies depende en gran medida del mecanismo de la combustión y el tipo de combustible utilizado.

Asimismo, es sabido que las reservas de petróleo y combustibles fósiles son agotables, lo cual ha traído incentivo a utilizar fuentes de combustible alternativos, así como mejorar considerablemente la eficiencia térmica de los que ya son usados.

Desde hace décadas que la tecnología de combustión en medios porosos se presenta como una alternativa al uso eficiente de los combustibles. Esto debido a que este tipo de quemadores presentan un listado de ventajas, tales como una gran transferencia de calor por radiación con el exterior, alta eficiencia de la combustión, muy bajas emisiones de NO_x y CO (para rangos operacionales específicos), capacidad de auto reignición, mayor modulación de potencia y la capacidad de quemar combustibles con bajo poder calorífico [3]. Esto se diferencia enormemente de la combustión de llama libre cuyas desventajas corresponden a una baja densidad de energía, bajo poder radiativo, problemas de estabilidad, bajo rango de potencia y emisiones elevadas de gases contaminantes. La superioridad de la combustión en medios porosos se debe a que al introducir un medio sólido se activa un proceso de recirculación de calor que utiliza los tres medios de transferencia de calor: conducción, convección y radiación. Esta recirculación calienta la mezcla entrante produciendo una reacción con exceso de entalpía.

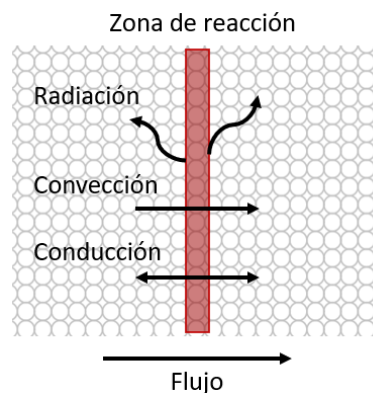


Figura 1.2: Mecanismos de transferencia de calor al interior de un medio poroso.

Al albergar llamas premezcladas, existe lo que se conoce la velocidad de quemado del combustible o velocidad de llama laminar (S_L). Esta propiedad genera inestabilidad y es la responsable de que exista desplazamiento de la zona de reacción ya sea aguas arriba o aguas abajo [4]. Es por esto que

existe un desafío en la CMPI: estabilizar la zona de combustión. El tener una llama estacionaria dentro de un medio poroso es determinante en cuanto a la factibilidad del uso de esta tecnología en aplicaciones industriales [3,5].

Si bien se han desarrollado variadas técnicas de estabilización del frente de combustión, existe una conocida como “convectiva” o variación continua del área transversal del medio poroso [6]. Tal técnica, a diferencia de las demás, es la única que tiene como objetivo modificar la velocidad de la mezcla entrante, con tal de que esta se equipare a la velocidad de quemado del combustible, para así alcanzar una llama estacionaria.

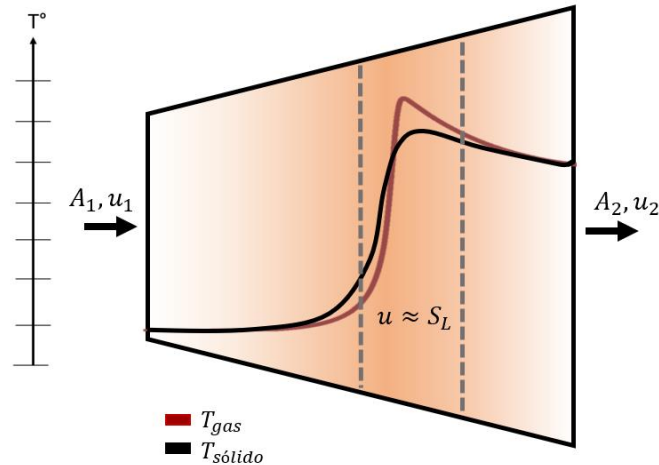


Figura 1.3: Método de estabilización convectivo.

Formalmente, esta técnica fue introducida por Bakry et al. [7], con el enfoque de crear un reactor capaz de trabajar a altas presiones, temperatura y potencia sin tener problemas de “flashback” o “blowout”, obteniendo resultados favorables. Numéricamente, se han investigado los comportamientos del frente de combustión al variar los puntos de operación de los reactores divergentes, junto con el ángulo de divergencia y las emisiones de estos [8–11]. Estos estudios se han realizado por medios de softwares comerciales de simulación, tales como Fluent y de manera estacionaria, alcanzando buenos resultados y con tendencias esperadas con respecto a lo experimental. Debido a que la de Bakry es la única investigación experimental disponible en la literatura de uso de un reactor completamente divergente, es que algunos trabajos numéricos existentes se basan en él. Entonces, así como experimentalmente, es necesario seguir investigando numéricamente la combustión en este tipo de reactores para así obtener más información respecto de la operación, comportamiento de los frentes de combustión y ventajas del uso de esta técnica, variando las configuraciones y condiciones de funcionamiento.

El presente trabajo abarca una modelación experimental y numérica de tres reactores de medio poroso contruidos a base de esferas sólidas de alúmina. Se hace estudio de un reactor cilíndrico, uno con ángulo medio de divergencia de 15° y uno de 30° , operando con mezclas pobres en propano. Se varía la relación combustible aire (relación de equivalencia) y velocidad del flujo de entrada con tal de estudiar el comportamiento del frente de combustión al interior de los

quemadores, monitoreados por termocuplas tipo S. En el caso numérico se utiliza un modelo matemático 2D transiente con una cinética química de 1 paso resuelto utilizando el método de diferencias finitas.

1.2 Objetivos

El presente trabajo de tesis tiene como objetivo general la investigación y desarrollo de un quemador de medio poroso divergente compuesto por esferas sólidas de alúmina que permite la estabilización de un frente de combustión en una zona específica del reactor.

Los objetivos específicos de la tesis son:

- Reconocer los conceptos básicos de la combustión transiente y estacionaria en medios porosos inertes y las técnicas de estabilización de un frente de combustión, principalmente la de área transversal variable
- Proponer un modelo matemático bidimensional transiente para predecir numéricamente el comportamiento y características de los frentes de combustión de propano en reactores de medio poroso inerte
- Desarrollar ensayos experimentales en laboratorio en reactores cilíndrico y divergentes
- Analizar y contrastar los resultados numéricos y experimentales de temperatura, velocidades de frente de combustión y gases producto.
- Presentar conclusiones y recomendaciones para futuros trabajos en reactores de medio poroso divergente

1.3 Estructura de la tesis

La física involucrada en el concepto de estabilización del frente de combustión dentro de la combustión en medios porosos, junto con una descripción de los conceptos básicos sobre esta tecnología son descritos en la primera sección del capítulo 2. Posteriormente, se describen las técnicas de estabilización existentes, con especial énfasis en la técnica convectiva, haciendo un repaso del estado del arte en el ámbito experimental y numérico. En el capítulo 3, se abarca el modelo experimental y numérico, en ese orden, detallando en el primero caso el arreglo experimental y operación de los reactores, junto con los esquemas representativos de cada quemador. Para el segundo caso, se presentan los métodos numéricos utilizados, las ecuaciones gobernantes y la discretización del modelo en diferencias finitas. En el capítulo 4 se presentan los resultados tanto experimentales como numéricos y su discusión correspondiente. En el capítulo 5 se resume el trabajo y se presentan las conclusiones más importantes, junto con recomendaciones y proyecciones para trabajos futuros que tengan como base el presente.

Capítulo 2:

2 Marco Teórico y Revisión bibliográfica

2.1 Combustión en MPI

El proceso de combustión que ocurre en los denominados quemadores de medio poroso se conoce como combustión premezclada. Esto se da cuando un flujo de oxidante se mezcla con uno de combustible previo al ingreso a la zona de reacción. Opuestamente, se tienen las llamas por difusión, las cuales se generan con un flujo de combustible que se mezcla por difusión con el oxidante presente en el ambiente.

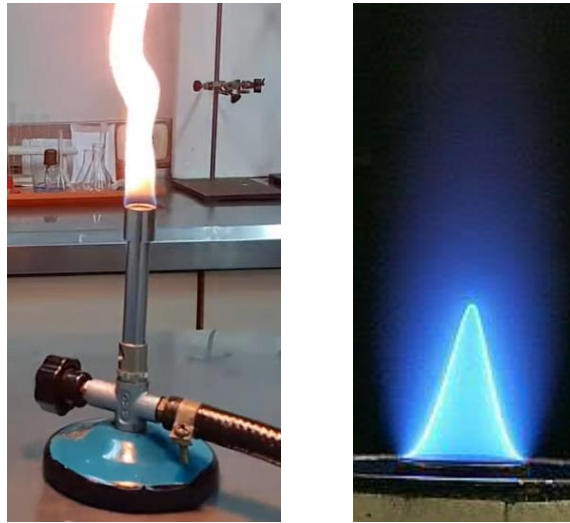
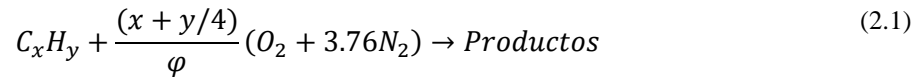


Figura 2.1: Llama de difusión (izquierda), llama premezclada (derecha).

Las llamas por difusión tienen el color amarillo característico debido a la presencia de hollín como producto secundario de una combustión poco eficiente, el cual adquiere luminosidad debido a la temperatura de la llama. Además, producen altas cantidades de ppm de NO_x y CO, sin embargo, son altamente estables. Las llamas premezcladas son inestables (como se detallará más adelante) pero tienen la ventaja de poder quemar mezclas pobres en combustible, producir muy bajas emisiones de NO_x y CO, y prácticamente carecer de hollín.

La combustión en medios porosos inertes consiste en el proceso de propagación de una zona de reacción exotérmica de un gas a lo largo de un sólido químicamente inerte, es decir, la propagación

de una llama premezclada a través de los poros presentes en el medio sólido. Existe una participación tanto del medio poroso como del gas reactante, en donde se pueden identificar cuatro zonas características, que se aprecian en la **Figura 2.2**. Como se explicó anteriormente, en los reactores de medio poroso se tiene un ingreso de una premezcla de combustible (primera zona), típicamente aire con la adición de un hidrocarburo gaseoso o atomizado, por lo general, este gas hace ingreso a temperatura ambiente, sin embargo, puede ingresar de forma precalentada dependiendo del arreglo experimental. La relación entre aire y combustible se controla por medio un factor de operación característico de la combustión, conocido como relación de equivalencia, φ [12]:



$$\varphi = \frac{(A/F)_{stoich}}{(A/F)} \quad (2.2)$$

La relación de equivalencia corresponde al cociente entre la relación aire combustible estequiometría y la relación con la que se está operando.

$$(A/F) = \frac{N_{aire} MW_{aire}}{N_{comb.} MW_{comb.}} \quad (2.3)$$

$$(A/F)_{stoic} = \frac{4.76(x + y/4) MW_{aire}}{1 MW_{comb.}} \quad (2.4)$$

Principalmente este factor se varía modificando los flujos máxicos de aire y combustible, por medio controladores de flujo. Cabe destacar, que cuando el valor de φ sea menor a 1 se trata de una mezcla pobre, cuando es igual a 1, se habla de mezcla estequiométrica, y cuando es mayor a 1 es una mezcla rica, cuya combustión da paso a lo que es conocido como oxidación parcial, que tiene entre sus productos el monóxido de carbono y el hidrógeno (gas de síntesis) [13].

La segunda zona se denomina de precalentamiento. En esta zona, la recirculación de calor que se da desde la zona de reacción (tercera zona) por medio de radiación y conducción, eleva la temperatura del medio poroso anterior, provocando que este genere un aporte calorífico a la premezcla entrante. La zona de reacción es muy estrecha y representa la zona de reacción química, la que se mueve en la misma dirección o en contra del flujo entrante de gas. La última zona es de post combustión, por ella fluyen hasta el exterior del medio poroso los gases provenientes de la reacción, es decir, los productos de combustión, los cuales pueden terminar de formarse mientras son expulsados por esta sección del reactor.

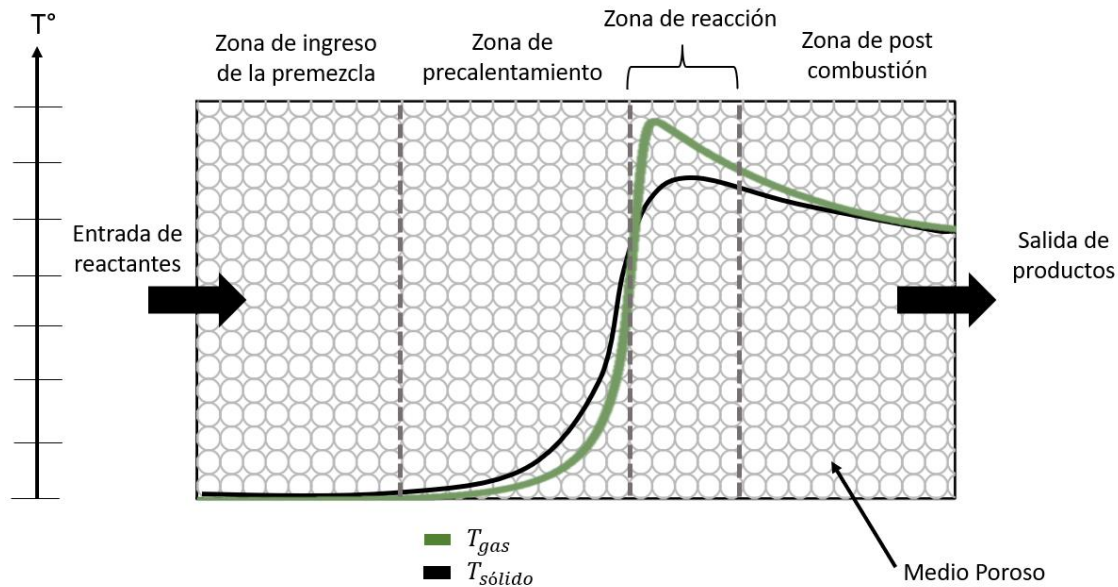


Figura 2.2: Representación de las zonas existentes en la combustión de MPI.

En la **Figura 2.3** se observa cómo se transfiere la energía dentro de un MPI [14]. Es evidente que existe una retroalimentación desde el medio poroso hacia la mezcla entrante, que genera finalmente una combustión precalentada. Esto da paso a una mejor combustión, inclusive posible para mezclas bastante pobres en combustible, gracias al aporte de entalpía que ayuda a mantener la continuidad de la reacción química, muchas veces descrito como “exceso de entalpía” (Weinberg [15]). Es así como este tipo de quemadores tienen un mayor rango de estabilidad de llama en comparación con quemadores convencionales al poder trabajar con mezclas bajas en poder calorífico. Más aún, al poder trabajar en estos rangos operacionales, es posible que los productos de combustión contengan muy baja concentración de CO y NO_x . No solo existe una recirculación de calor dentro del medio poroso [16], si no que a la vez existe un gran aporte de calor hacia el exterior por medio de radiación. Todo esto hace atractivo a usar quemadores de medio poroso en aplicaciones industriales y domésticas para ahorrar combustible y tener un uso eficiente de energía [5,17].

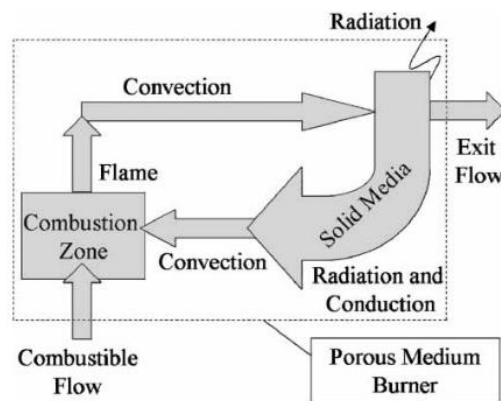


Figura 2.3: Recirculación de calor en un quemador de MPI [14].

2.1.1 Materiales

Los materiales utilizados como medio poroso en este tipo de quemadores son altamente resistentes a la temperatura, stress térmico, tienen altas capacidades térmicas y poseen una gran área superficial interna. Generalmente, se hace uso de materiales cerámicos como por ejemplo el óxido de circonio (ZrO_2), la alúmina (Al_2O_3) y carbono de silicio (SiC) [18]. También, aunque menos común, es posible utilizar materiales metálicos, como aleaciones de hierro, aceros inoxidable [17], etc.

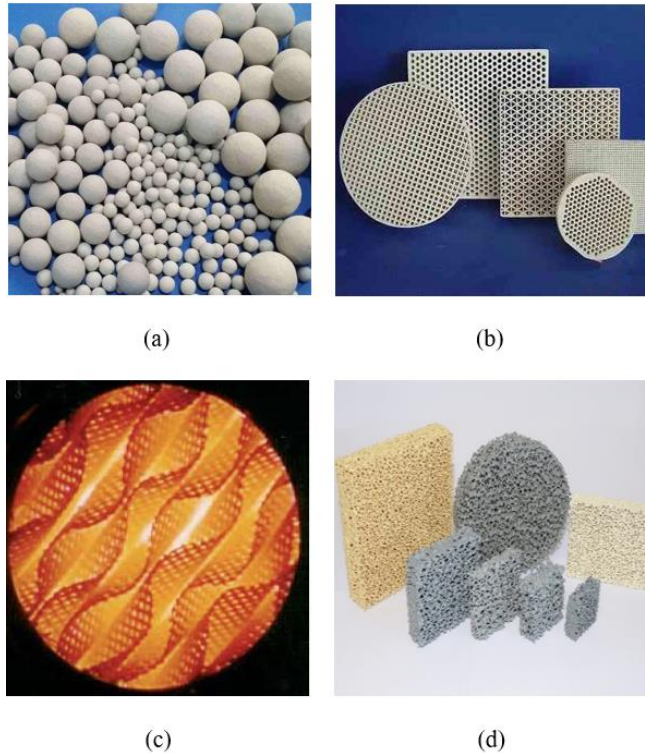


Figura 2.4: Estructuras porosas cerámicas. **a)** esferas, **b)** honeycomb, **c)** laminar, **d)** esponja.

La geometría de los medios porosos es variable y cada una de las formas tendrá ventajas y desventajas, por lo cual se debe seleccionar cuidadosamente. Los tipos se pueden identificar en la **Figura 2.4**, a excepción del medio poroso metálico, que corresponde al mallado de acero. Existen medios porosos consolidados y no consolidados. Dentro de los consolidados destacan los tipos honeycomb o panal (**b**), las esponjas (**d**) y los medios laminares (**c**). Los medios no consolidados corresponden a un conjunto de elementos discretos, tales como esferas (**a**), cilindros u otras geometrías, acumulados en un espacio cerrado, en inglés se conocen como “packed-bed”.

Las esferas se caracterizan por su durabilidad, gracias a su tamaño pequeño y forma robusta, mientras que las esponjas al ser rígidas se vuelven frágiles a altas temperaturas. Los materiales de Al_2O_3 y ZrO_2 pueden ser usados a temperaturas mayores a $1650^{\circ}C$ (temperatura límite del SiC), de hecho, pueden aguantar hasta $1900^{\circ}C$ y $1800^{\circ}C$, respectivamente [19]. No obstante, estas temperaturas no son alcanzadas en la práctica. Cada estructura o lecho empacado es distinto de

acuerdo con el material y las especificaciones de cada fabricante, lo cual tiene consecuencia directa en el desempeño del quemador.

La porosidad (Φ) se define como el porcentaje de área libre que tiene un medio sólido en comparación con el área completa del cuerpo. Esta propiedad tiene impacto en las propiedades térmicas del medio, vale decir, mientras más porosa sea la zona, será más resistente a shocks térmicos y tendrá menor capacidad conductiva, pero mejor capacidad radiativa, por otro lado, a menor porosidad, se tendrá mejor transporte calorífico, mayor tiempo requerido para su precalentado y mayor pérdida de presión [19,20].

$$\Phi = \frac{V_{poro}}{V_t} \quad (2.5)$$

Una ventaja que tienen las estructuras esponjosas por sobre las demás, es que se puede controlar de mejor manera la cantidad de poros que se tiene por sección específica (PPI o pores per inch) y, por ende, la porosidad. Caso contrario son las esferas, cuyo factor de diseño son los diámetros de partícula.

2.2 Combustión Transiente vs Estacionaria

La combustión en MPI se puede dar de dos maneras: transiente y estacionaria. De la primera manera, el frente de combustión existente se mueve libremente por el medio dependiendo de la fluido-mecánica involucrada y la transferencia de calor existente. De la segunda manera, el frente de combustión se estabiliza en un punto fijo a lo largo del reactor y esto puede deberse a una configuración puntual de la relación combustible aire o debido al uso de una técnica de estabilización, materia en la que se ahondará posteriormente.

En el caso transiente, se tendrán dos posibilidades: desplazamiento aguas abajo y aguas arriba. Un desplazamiento del frente aguas arriba, implica que la velocidad de quemado del combustible supera a la velocidad del flujo entrante de premezcla. En cuanto a las temperaturas dentro del reactor, estas serán sub adiabáticas, debido a que la reacción irá calentando un medio poroso frío. Caso contrario, cuando la velocidad del flujo supera a la velocidad del quemado del combustible, se tendrá el llamado desplazamiento aguas abajo, alcanzando temperaturas super adiabáticas, debido a que la premezcla que entra a la reacción se desplazará por un medio poroso calentado por la misma reacción [21].

La combustión transiente puede ser caracterizada por el régimen descrito por la velocidad del frente de combustión, como se observa en la **Tabla 2.1**. Sin embargo, en el caso de estudio interesa el régimen de baja velocidad (LVR) y el de alta velocidad (HVR), cuyas velocidades se encuentran en el rango de 0 a 10^{-4} y 0.1 a 10 m/s.

Tabla 2.1: Regímenes de velocidad en combustión [22].

Régimen	Rango de velocidad (m/s)	Mecanismo de propagación
Régimen de baja velocidad (LVR)	$0 - 10^{-4}$	Conducción de calor e intercambio de calor entre fases.
Régimen de alta velocidad (HVR)	$0.1 - 10$	Alta convección
Régimen de combustión rápida (RCR)	$10 - 100$	Convección con gradiente de presión bajo
Régimen a velocidad sónica (SVR)	$100 - 300$	Convección con gradiente de presión significativo
Detonación a baja velocidad (LVD)	$500 - 1000$	Auto ignición con onda de choque
Detonación normal (ND)	$1500 - 2000$	Detonación con pérdida de calor y momentum

2.2.1 El Número de Péclet

Para que efectivamente se pueda dar la combustión dentro de un medio poroso, en un régimen LVR o HVR, se debe analizar el número de Péclet modificado asociado a la configuración [23].

$$Pe = \frac{S_L d_p \rho_g C p_g}{\lambda_g} = \frac{S_L d_p}{\alpha_g} \rightarrow \frac{\text{advección}}{\text{difusión}} \quad (2.6)$$

Se dice número de Péclet modificado debido a que se construye con la velocidad de llama laminar en vez de una velocidad de flujo. Este número describe la razón entre la liberación de calor por parte de la combustión dentro de un poro y la pérdida de calor a través de la pared del poro [19]. En mayor detalle, el número de Péclet aparece cuando se adimensionaliza la ecuación de temperatura de un fluido (omitiendo fuentes):

$$\rho_f C p_f \frac{\partial T_f}{\partial t} + \rho_f C p_f \vec{u}_g \cdot \nabla T_f = \text{div}(\lambda_f \nabla T_f) \quad (2.7)$$

Adimensionalizando adecuadamente, resulta:

$$St \cdot \rho^* \frac{\partial T_f^*}{\partial t^*} + \rho^* \vec{u}_g^* \cdot \nabla T_f^* = \frac{1}{Pe} \nabla \cdot (\lambda_f^* \nabla T_f^*) \quad (2.8)$$

También, se puede deducir que el número de Péclet es igual al número de Reynolds multiplicado por el número de Prandtl.

$$Pe = Re \cdot Pr \quad (2.9)$$

El número crítico de la relación (2.6) tiene un valor cercano (generalmente) a:

$$Pe = 65 \pm 45 \quad (2.10)$$

Por sobre este número, es posible que en el medio poroso frío exista propagación libre del frente de combustión. Si el valor del número de Péclet es menor al crítico, el frente de combustión se extinguirá debido a que el medio poroso le quitará mayor energía al gas de la que se está produciendo. No obstante, si se asegura una temperatura alta del medio poroso (por ejemplo, precalentando el medio) el frente podrá existir. Por último, se puede observar que modificando el diámetro del poro es que se puede modificar el número, por lo cual es un factor de diseño importante en el tipo de medio escogido.

2.2.2 Velocidad de Llama Laminar

La velocidad de llama laminar es la medida de propagación de un frente de llama relativo a la mezcla entrante (no quemada) y está relacionada estrechamente con la tasa de quemado dentro de un reactor. Vale decir que esta propiedad es intrínseca a las llamas premezcladas. Esta velocidad puede ser hallada mediante un análisis simplificado, detallado o bien mediante correlaciones, como por ejemplo la de Metghalchi y Keck, la que ha sido validada para variados combustibles [24].

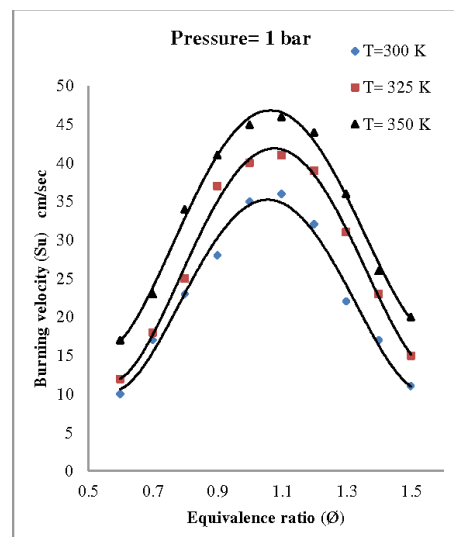


Figura 2.5: Velocidad de llama laminar en función de la relación de equivalencia para mezclas propano-aire para diferentes temperaturas de precalentamiento [25].

Para hidrocarburos, se tiene típicamente el perfil mostrado en la **Figura 2.5** para la velocidad de llama laminar, en función de la relación de equivalencia. Ante todo, esta variable es función de la composición de la mezcla entrante a la reacción, la temperatura y la presión. Típicamente, se tienen las siguientes velocidades de llama laminar para mezclas estequiométricas a condiciones ambientales normales:

Tabla 2.2: Velocidad de llama laminar para distintos combustibles, quemados con aire $\phi = 1$, 1 atm y temperatura ambiente [12].

Combustible	Fórmula	Velocidad de Llama Laminar S_L (cm/s)
Metano	CH_4	40
Acetileno	C_2H_2	136
Etileno	C_2H_4	67
Etano	C_2H_6	43
Propano	C_3H_8	44
Hidrógeno	H_2	210

2.3 Flashback y Blowout

Dentro de lo que es la combustión transiente en medios porosos, es decir, con régimen aguas abajo o aguas arriba, existe la fenomenología del flashback y blowout. Cuando existe un desplazamiento aguas arriba del frente de combustión y se adentra a una zona en donde no se tiene el diseño para soportarla o que se siga desplazando, se está frente a un fenómeno denominado flashback. Es algo indeseado, ya que al igual que la autoignición de la premezcla antes de hacer ingreso al reactor, puede destruir el equipo o las líneas que alimentan el quemador, incluso llegando a dañar el equipo. La principal razón para que exista flashback o bien, un movimiento incontrolado del frente aguas arriba, es que la rapidez de quemado (ya sea laminar o turbulenta) de la premezcla supere la velocidad del flujo entrante. Sin embargo, existen otras razones para la existencia del flashback, tales como una inestabilidad en la combustión, flashback en la capa límite (pared) o combustión en vórtice [26].

Debido a esta fenomenología es que en llamas premezcladas se debe mantener un monitoreo constante al trabajar en regímenes aguas arriba y, por seguridad, es importante que un reactor cuente con una porción denominada como trampa de llama o supresor de llama. Esta porción puede ser de un material distinto al del medio poroso o igual, pero con un número de Péclet subcrítico.

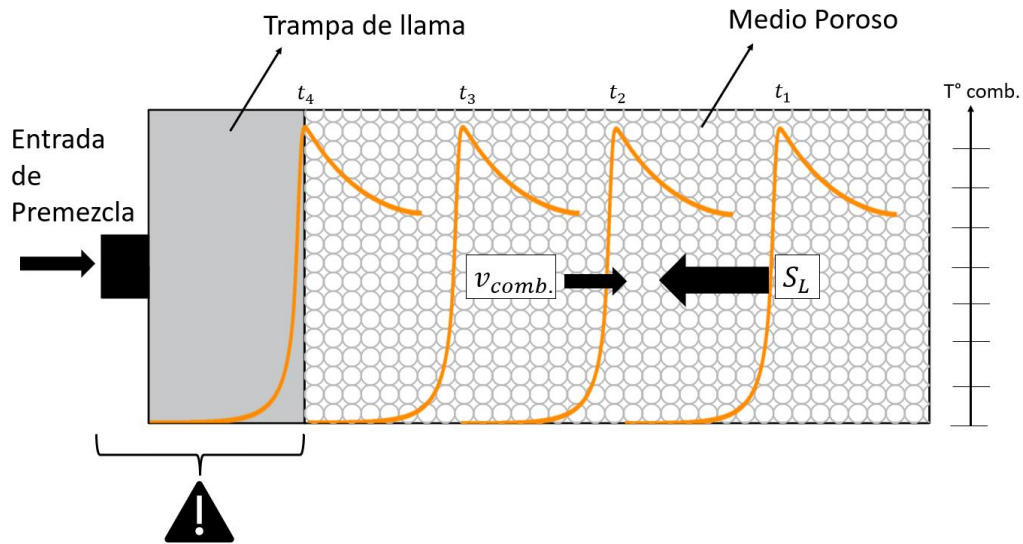


Figura 2.6: Representación gráfica del flashback.

El blowout es un fenómeno opuesto al flashback y ocurre cuando no existe un punto de estabilización posible, pero en dirección aguas abajo. Esto quiere decir, que la llama puede emerger del medio poroso hasta el punto de salir de este y despegarse completamente del reactor. Si esto ocurre, la llama empezará a diluirse con el aire del ambiente volviéndose así más pobre, por lo cual su velocidad de quemado irá en disminución (**Figura 2.5**), no pudiendo contrarrestar la velocidad de flujo axial. Finalmente, al empobrecerse la mezcla, seguirá un régimen aguas abajo con menor concentración de combustible, la combustión inminentemente deja de existir. Es así como la velocidad necesaria para un blowout disminuye mientras más pobre o rica sea la mezcla. Por otro lado, el medio poroso se empezará a enfriar, por lo cual la premezcla no podrá ser calentada. Este fenómeno es ampliamente estudiado tanto en llamas premezcladas como en llamas de difusión [26–28].

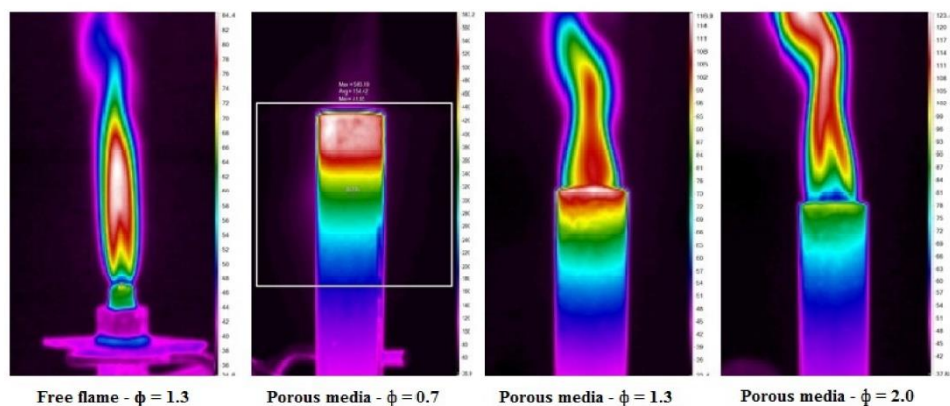


Figura 2.7: Frente de combustión en CMPI y llama libre [29].

2.4 Estabilización del frente de combustión en CMPI

La búsqueda de la estabilización del frente de llama en combustión en medios porosos nace desde el principio de poder utilizar esta tecnología en aplicaciones industriales o domésticas. Sin una estabilización dentro del medio poroso o con periodos de tiempo limitados para los cuales el frente de llama se encuentra dentro del medio poroso o área de diseño, se tendría que regular y monitorear el comportamiento del frente constantemente con tal de evitar el flashback o emergencia del frente a la superficie para posterior enfriamiento del medio y un inevitable blowout. Debido a esto, se han dedicado años de investigación e ingeniería para adoptar técnicas de estabilización del frente de combustión, sin sacrificar las ventajas del uso de tales reactores.

Se entenderá como estabilización del frente de combustión al posicionamiento prolongado de la zona de reacción en un área determinada dentro del reactor de medio poroso. Por otro lado, se entiende como combustión estable a la continuidad de la reacción de manera ininterrumpida durante el periodo de funcionamiento del reactor.

2.4.1 Ventajas de la Estabilización en CMPI

Una combustión dentro de un medio poroso de manera estable puede, en comparación con combustión de llama libre, puede traer consigo las siguientes ventajas:

- Rango amplio y variable de potencia
- Alta densidad de potencia por área transversal
- Emisiones de CO y NOx bajas
- Combustión estable en un gran rango de relación de equivalencia
- Alta estabilidad de la combustión gracias a la capacidad calorífica del medio poroso.

2.4.2 Técnicas de Estabilización del frente de combustión en CMPI

La primera técnica de estabilización se refiere a la operación inestable, de hecho, ésta es la técnica usada en los reactores de flujo recíproco [30]. La técnica recae en que, cuando el frente de combustión recorre el reactor hasta llegar a su extremo, el flujo de mezcla entrante se reversa, para que así el frente viaje en la dirección contraria, esto se repite continuamente. Debido a que las direcciones de flujo se alternan, la mezcla de combustible puede aprovechar el calentamiento del medio poroso del ciclo anterior, así es posible alcanzar regímenes super adiabáticos fácilmente. Además, mezclas gaseosas con bajo contenido calorífico pueden ser quemados.

Otra técnica que sigue el mismo lineamiento anterior es la estabilización por control activo. Esto se refiere al monitoreo constante de la temperatura del medio poroso a través de termocuplas o aparatos afín. Teniendo en mente que se puede medir la ubicación del frente de combustión, se puede manipular la relación entre aire y combustible mediante controladores de flujo másicos, para

así ubicar el frente en una posición deseada. Sin embargo, esta técnica tiene un rango operacional bastante bajo y para cada configuración solo existirá 1 único punto de operación estacionaria.

Además de las anteriores, se pueden identificar cuatro técnicas de estabilización en CMPI, como se muestra en la **Figura 2.8**, las cuales no requieren un control activo. La estabilización por “thermal quenching” o enfriamiento térmico, hace uso de 2 capas de medio poroso. El medio poroso donde incide el flujo al entrar al reactor corresponde a uno con un diámetro característico bajo, por lo cual el número de Péclet es subcrítico. Además, esta capa es de menor conductividad térmica por lo que la rapidez de quemado es menor y sirve prácticamente como una zona de precalentamiento de la mezcla la capa porosa posterior a ésta es totalmente opuesta, su número de Péclet es supercrítico y de alta conductividad térmica, haciendo que el frente de combustión se estanque en la interfase entre las dos capas. Así como un cambio radical en el número de Péclet es importante un cambio en la transferencia de calor del sólido [19].

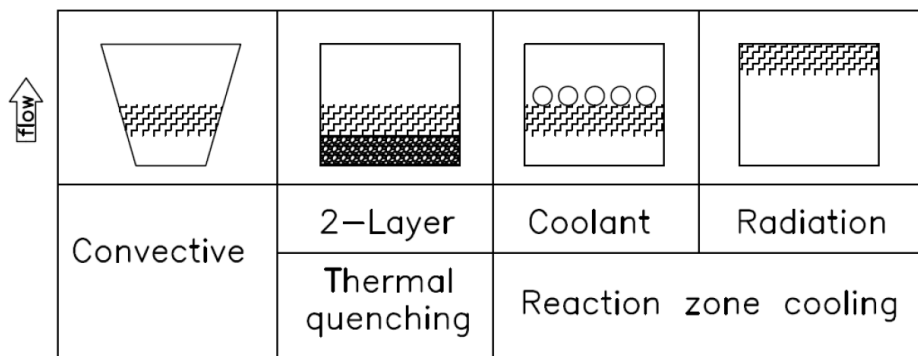


Figura 2.8: Técnicas de estabilización en CMPI [21].

Por otro lado, se tienen las técnicas que enfrían el frente de combustión mismo: enfriamiento por agente externo y enfriamiento por radiación. El primero, utiliza tubos de enfriamiento en la zona donde se está llevando a cabo la reacción, debido a que una mayor transferencia de calor desde la zona de reacción hacia una matriz sólida más helada hace que la mezcla entrante no sea precalentada (al menos no en gran medida), haciendo que el frente se estanque en ese lugar. Por ejemplo, se podrían utilizar tubos con agua incrustados en el medio poroso. La segunda técnica es llamada enfriamiento por radiación debido a que se da en forma tal que el frente de combustión se estabiliza en el borde superior del reactor en el límite entre el ambiente y el sólido, intercambiando activamente calor por radiación. Sin embargo, esta técnica debe ser usada en un medio poroso subcrítico, caso contrario existiría inmersión del frente de llama y posterior flashback, igualmente, si se quisiera incrementar el flujo másico de la mezcla entrante (velocidad de filtración) la llama se ubicaría fuera del medio poroso, pudiendo provocar altas emisiones o incluso blowout.

La última técnica, llamada muchas veces “convectiva” será explicada en la próxima sección con mayor detalle.

2.5 Reactor de Medio Poroso Divergente

2.5.1 Teoría

Un medio poroso divergente es aquél donde se tiene un medio poroso continuo, pero con cierto ángulo de inclinación en las paredes, en donde el área transversal aumenta conforme el flujo se desplaza aguas abajo. Este tipo de reactores (por lo general) se fabrica de forma tal que se asegura un número de Péclet supercrítico, con tal de que el frente se pueda desplazar libremente. El principio que sigue este tipo de reactores se basa en la conservación de masa y la transferencia de calor, con el fin de estabilizar el frente de combustión en una posición deseada y aumentar el rango de operación del reactor. La ecuación para la conservación de masa de un flujo libre se expresa como:

$$u_{axial} = \frac{\dot{m}}{\rho_g A \Phi} \quad (2.11)$$

$$\nabla(\rho_g \cdot \vec{u}) = 0 \quad (2.12)$$

Se puede notar que a medida que aumenta el área transversal, el sistema se compensa haciendo disminución de la velocidad, ley conocida como conservación de masa. Por otra parte, el hecho que aumente el área gradualmente hace que la cantidad de área que debe calentar la reacción sea mayor, generando un efecto térmico que aumenta el flujo de calor hacia el medio poroso. Finalmente, estos dos efectos se combinan para generar una estabilización del frente de combustión, en comparación con las demás técnicas, las cuales no intervienen de forma directa con la velocidad de la premezcla. No obstante, a consecuencia de que la velocidad sea forzada a disminuir conforme se avanza por el medio poroso es que no es posible usar estos reactores con velocidades de filtración bajas, debido al inevitable riesgo de flashback. Junto con buscar una estabilización del frente de combustión, esta técnica tiene como objetivo buscar un mayor rango de operación para las determinadas relaciones combustible-aire, como, por ejemplo, utilizar altas potencias (por ende, flujos másicos) sin tener riesgo de blowout. Además de esto, esta técnica se ha desarrollado para altas presiones y temperaturas de entrada de los reactantes, algo que se ha sabido tiene incidencia en la velocidad de quemado del combustible [31].

Con respecto al ángulo de divergencia, en la literatura se ha encontrado distintas maneras de abarcarlo, por lo cual se definirá este ángulo para evitar confusiones y discrepancias como se observa en la **Figura 2.9**, denotado por θ . En el siguiente esquema, se puede observar que el ángulo se considera como aquél relativo a la perpendicular o altura total hacia la pared.

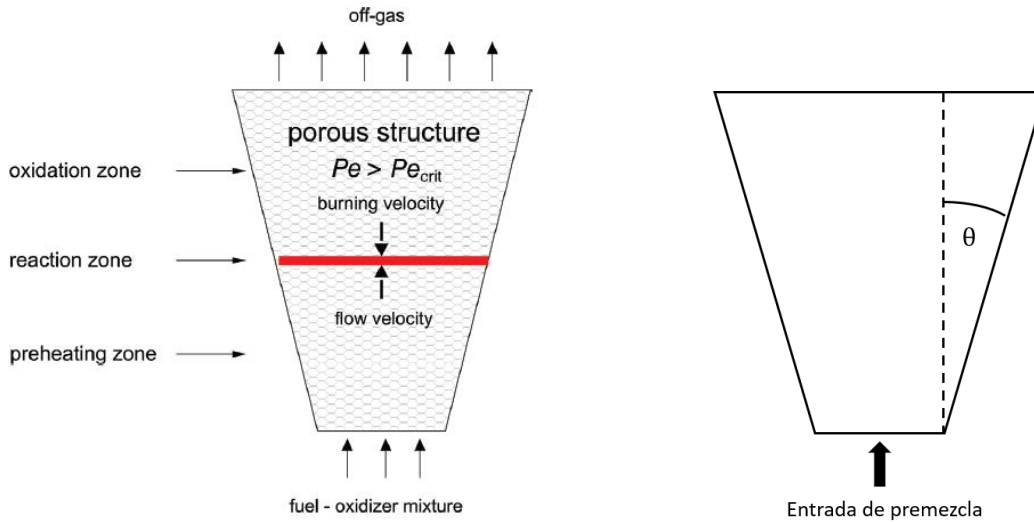


Figura 2.9: Estructura de un reactor de medio poroso divergente [6] y definición del ángulo de divergencia.

2.5.2 Estado del arte

A continuación, se hace una revisión bibliográfica de trabajos tanto experimentales como numéricos sobre combustión en medios porosos inertes divergentes.

2.5.2.1 Experimental

El trabajo de Bakry et al. [7] es la primera investigación formal en cuanto a este tipo de reactores, en donde se hace uso de una configuración en la cual se varía la presión dentro del reactor, así como la temperatura de entrada de los reactantes. El medio poroso utilizado corresponde a Al_2O_3 laminado, con un ángulo de divergencia de 20° . Haciendo uso de mezclas metano-aire como combustible, se estudia el efecto de la relación de aire, flujo másico, presión y temperatura inicial de la mezcla para observar los efectos en los rangos de operación y perfiles térmicos. Cabe destacar que se hizo uso de mezclas pobres en combustible, variando la relación de aire ($1/\phi$) desde 1.2 a 3. Sus estudios arrojaron que los efectos de la elevada presión y temperatura de entrada de la mezcla afectan la velocidad de propagación del frente de combustión, haciendo que éste se mueva más rápido, además de presentar ignición espontánea. En específico, estos efectos generan que el frente se ubique en porciones del reactor cercanas al ingreso de la mezcla, por lo cual deja abierto a investigación variar el ángulo de divergencia o las áreas para compensar este efecto. Ante todo, los rangos de operación aumentaron considerablemente en comparación con un reactor convencional, principalmente influenciados por el aumento de temperatura de ingreso de la premezcla, como se muestra en la **Figura 2.10**. Por otro lado, la velocidad máxima admisible antes del blowout se mantiene prácticamente independiente para altas presiones.

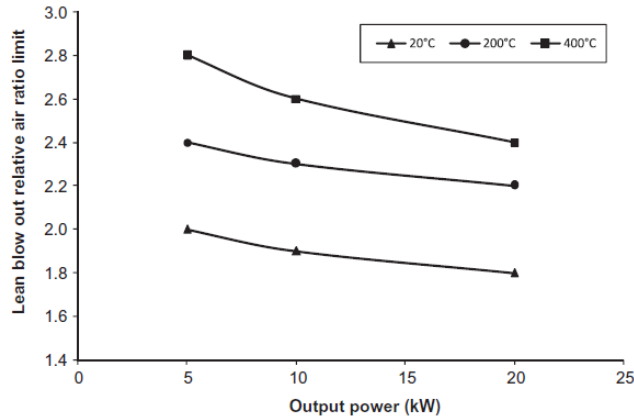


Figura 2.10: Límite de blowout relativo a la mezcla aire combustible en función de la potencia para distintas temperaturas de precalentamiento. Resultados del trabajo de Bakry et al. [7].

Derivado del mismo estudio anterior pero enfocado en las emisiones MPI divergente, Bakry et al. [32] concluye que, de acuerdo con un mayor tiempo de residencia de los gases de post combustión en el medio poroso, acompañado de un proceso prácticamente adiabático, las emisiones de CO alcanzadas son prácticamente cero. Además, las emisiones de NO_x , como se muestra en la **Figura 2.11**, tienden a 0 ppm al aumentar la relación de aire combustible y alcanza valores por debajo de las 10 ppm para una relación de 1.45 en adelante a condiciones ambientales, esto prácticamente independiente de la potencia (flujo másico) utilizada. También, se encontró que, a temperatura inicial constante, estas emisiones dependen de la presión a relaciones de aire bajas, ya que, a mayor presión, mayores emisiones. Por otro lado, a presión y relación de aire constante, existe dependencia de la temperatura inicial, haciendo que estas aumenten conforme aumenta la temperatura. Ante todo, las bajas emisiones alcanzadas demuestran el potencial de esta técnica de estabilización para ser usada en aplicaciones que resuelvan problemas a futuro que tengan que ver con emisiones contaminantes.

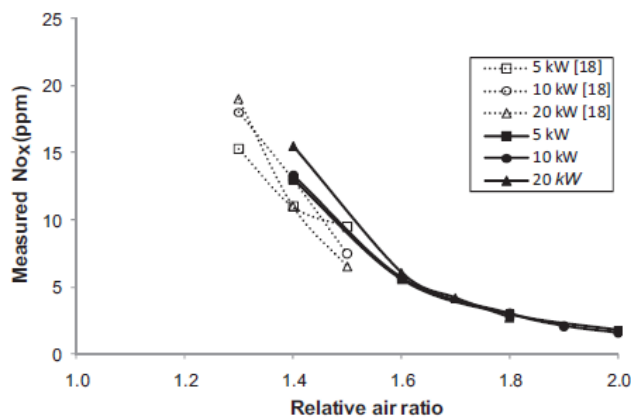


Figura 2.11: Ppm de NO_x medidos a diferentes relaciones de aire para distintas potencias. Bakry et al. [32].

Voss et al. [33] hace estudio de esta técnica de estabilización implementando un reactor cónico al comienzo, para luego terminar de forma cilíndrica, como se muestra en la **Figura 2.12**. A pesar de que el reactor muestra una gran porción cilíndrica, la experimentación arrojó que los frentes de combustión para los flujos másicos usados se estabilizan en la sección cónica del reactor. Sin embargo, este estudio está enfocado en los espesores de los frentes de combustión de mezclas H_2 y CO bajas en aporte calórico, contrastándolos con resultados numéricos, por lo cual no se hace hincapié en cómo la geometría del reactor cambia los rangos de operación ni cómo se comporta en la sección cónica.

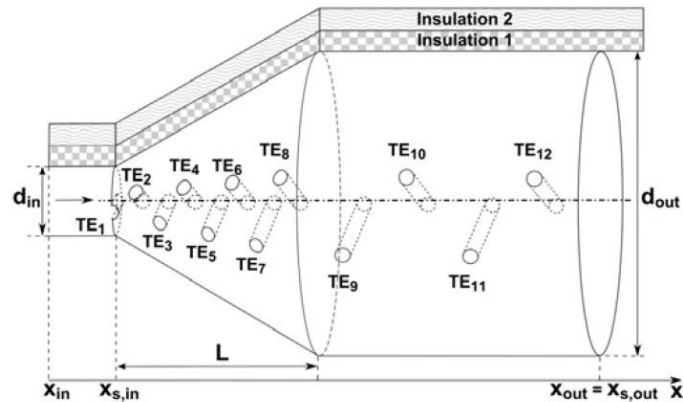


Figura 2.12: Reactor usado en el trabajo de Voss et al. [33].

Existen otros trabajos experimentales que han intentado incursionar en la geometría divergente, similar a Voss et al. [33], ([34,35]) lo cual no abarca la totalidad del reactor y sólo constituye una porción inicial acotada. La primera sección cónica se utiliza para estabilizar el frente y la zona cilíndrica de post combustión constituye una porción que provee el tiempo adecuado para que ocurran las reacciones pertinentes, como por ejemplo de reformado (en caso de usar mezclas ricas en combustible). Estas investigaciones no se enfocan principalmente en el comportamiento del frente de combustión ante la geometría variable y los factores influyentes, más bien se menciona que existe estabilización del frente en tal sección, lo cual favorece la aplicación a la que está destinada el quemador, por ejemplo, la producción de hidrógeno. Sin embargo, demuestra la factibilidad de la técnica y da pie al uso de un reactor divergente en su totalidad.

2.5.2.2 Numérico

En el ámbito de las simulaciones numéricas, el trabajo de Bakry et al. [7] marca un eje central, siendo reconocido como el contraste experimental para estos trabajos. Lin et al. [9] hace uso de mezclas pobres en metano con una cinética de 16 especies y 41 reacciones en un reactor de medio poroso de alúmina laminar. Se encontró que las temperaturas máximas aumentan conforme se incrementa la relación de equivalencia además de que el frente tiene a estabilizarse aguas arriba. Por otro lado, al aumentar la temperatura de la mezcla de entrada, se aumenta considerablemente las emisiones de NO . Ante todo, el rango de operación del reactor aumenta considerablemente en comparación con uno cilíndrico.

El trabajo de Hashemi et al. [8], hace uso de mezclas pobres de metano y una reacción de un paso, y hace enfoque en la variación del ángulo de divergencia ampliamente. Se encuentra que, basándose en las dimensiones del arreglo experimental de Bakry et al. [7], el ángulo de divergencia óptimo es de 30° (se hizo variar desde 10° a 40°), incrementando el rango de estabilización del frente de combustión, esto debido a que tal punto es óptimo para la utilización de una alta velocidad de mezcla antes de que ocurra un inminente blowout. Por otro lado, un aumento en la relación de equivalencia trae consigo de igual manera un aumento de la velocidad máxima admisible. También se recalca cómo la ubicación y la estabilidad del frente, para una determinada relación de equivalencia, puede ser controlada solamente variando la velocidad de la mezcla entrante.

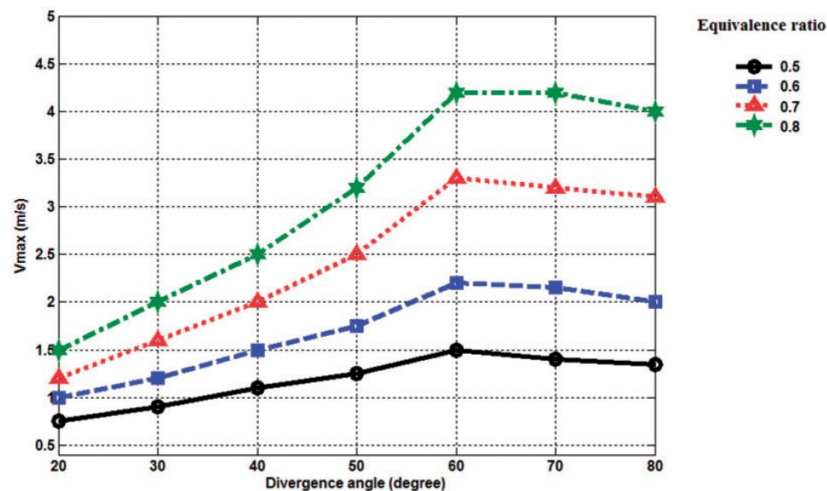


Figura 2.13: Influencia del ángulo de divergencia (2θ) en la velocidad máxima admisible del flujo antes del blow-out [8].

Qian et al. [10] hizo enfoque en un reactor de meso escala, de largo 21 mm, para una aplicación a pequeña escala, enfocada en el desarrollo de generación de energía como por ejemplo los sistemas fotovoltaicos. Se utilizó una geometría pequeña y velocidades de flujo altas, debido a que el combustible simulado fue H_2 /aire, que corresponde a uno muy reactivo. Se estudió la posición de llama, velocidad de quemado y eficiencia de radiación. Principalmente, se tienen los mismos resultados en cuanto a los efectos de la relación de equivalencia y velocidad de filtración que se presentaron anteriormente. Sin embargo, el descubrimiento más destacable es que el límite de blowout se incrementa considerablemente en comparación con el trabajo experimental para un reactor plano convencional. Como se muestra en la **Figura 2.14**, este límite para relaciones de equivalencia de 0.6 y 0.8 se incrementa por un 167% y 186%, respectivamente. Los cálculos fueron realizados con el software Fluent. El medio poroso utilizado corresponde a un mallado metálico, haciendo uso de un mecanismo de 10 especies y 21 reacciones, obtenido de CHEMKIN.

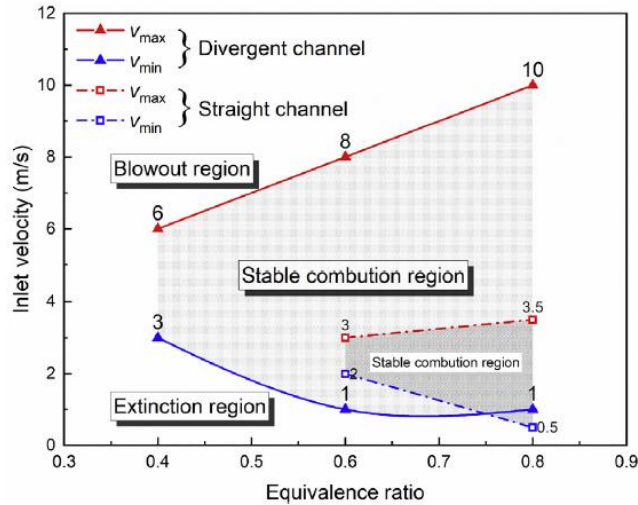


Figura 2.14: Límite de flamabilidad para reactor divergente y reactor recto Qian et al. [10].

Dai et al. [11] llevó a cabo una investigación de mezclas ricas en metano, con el fin de producir hidrógeno. Hace uso de un mecanismo de 41 reacciones y 16 especies y utiliza un medio poroso de dos capas, en donde se tiene una sección recta y una cónica agua abajo. Se estudia el cambio de ángulo de divergencia, diámetro de las esferas del medio poroso, relaciones de equivalencia desde 1.3 a 2.5 y la eficiencia de conversión a gas de síntesis. Se encuentra que un ángulo de 15° pudo producir una mayor cantidad de H_2 , encontrándose una eficiencia de conversión del 45.8 % para una relación de equivalencia de 2. No obstante, se da un proceso inverso a lo que respecta los límites de velocidad de las mezclas pobres, ya que a medida que se incrementa la relación de equivalencia, los límites superiores de velocidad decrecen, como se muestra en la **Figura 2.15**. Además, el aumento de la relación de equivalencia hace que el frente de combustión se desplace aguas abajo, pero a una menor temperatura.

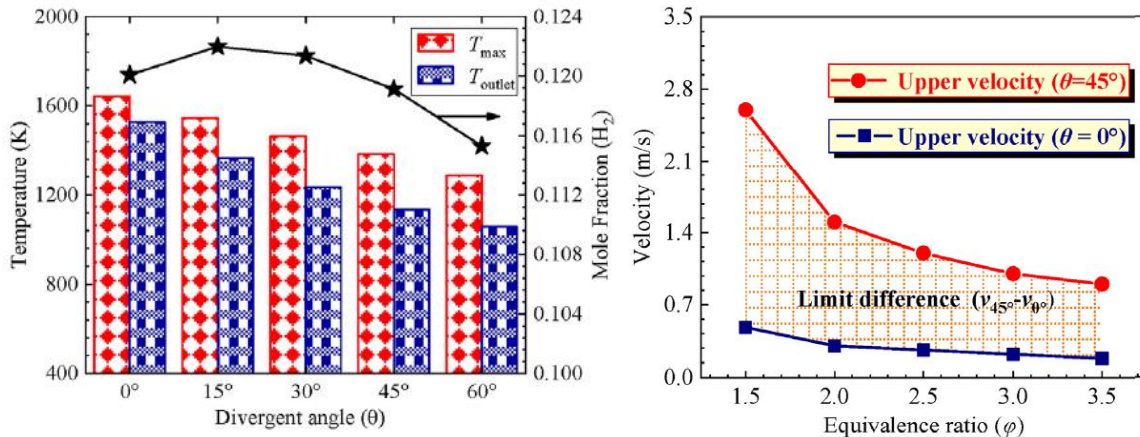


Figura 2.15: Izquierda: Temperatura máxima y fracción molar de hidrógeno alcanzada para una relación de equivalencia de 2 para variados ángulos de divergencia. Derecha: Límites de operación entre ángulos de divergencia 0° y 45° .

Capítulo 3:

3 Desarrollo del Modelo Matemático y Metodología Experimental

En el presente capítulo se expone el modelo matemático, es decir, las ecuaciones gobernantes que determinan las variables de estudio. Posteriormente se desarrolla la resolución numérica del modelo, lo que incluye el mallado de los dominios tanto cilíndricos como divergentes, la discretización numérica de acuerdo con los esquemas escogidos y algoritmo de resolución. Finalmente, se presenta la metodología experimental, esto es, esquemas de los reactores, descripción del arreglo experimental utilizado y procedimiento de los ensayos.

3.1 Modelación matemática

3.1.1 Ecuaciones gobernantes

3.1.1.1 Ecuación de conservación de masa

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) = 0 \quad (3.1)$$

La densidad de la mezcla gaseosa ρ_g cambia de acuerdo con la ley de gas ideal:

$$\rho_g = \frac{P_{atm} \bar{W}}{R_u T_g} \quad (3.2)$$

Con:

$$\bar{W} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{N_s} \frac{Y_k}{W_k}} \quad (3.3)$$

La velocidad del flujo gaseoso \vec{u} se calculará mediante líneas de corriente, teniendo en consideración que existe una caída de presión impuesta por el medio poroso.

3.1.1.2 Caída de presión dentro del medio poroso

$$\nabla P = R_p \quad (3.4)$$

En donde R_p corresponde a la caída de presión de acuerdo con las leyes de Darcy y Forchheimer [36]:

$$R_p = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\mu_g}{k_0} \vec{u}, & \text{si } Re < 10 \text{ (Darcy)} \\ \left(\frac{\mu_g}{K} + \rho_g C |\vec{u}| \right) \cdot \vec{u}, & \text{si } Re \geq 10 \text{ (Forchheimer)} \end{array} \right\} \quad (3.5)$$

Para discriminar si utilizar la formulación de Darcy o Forchheimer, se hace cálculo del número de Reynolds local modificado para flujo dentro de un medio poroso basado en el diámetro de partícula [37].

$$Re_p = \frac{\Phi u_z d_p \rho_g}{\mu_g} \quad (3.6)$$

Sin embargo, en la resolución del cálculo de la velocidad se hará uso de la formulación de Forchheimer, debido a que es válida para un mayor rango de velocidades que la de Darcy. Esto se debe a que a un valor del número de Reynolds mayor a 10 (aproximadamente) los efectos inerciales por parte de la turbulencia generan comportamientos no lineales.

Luego, es necesario calcular los coeficientes asociados a la pérdida de presión propios de la matriz porosa:

$$K = \frac{d_p^2 \Phi^3}{150 \cdot (1 - \Phi)^2} \quad (3.7)$$

$$C = \frac{1.75 \cdot (1 - \Phi)}{d_p \Phi^3} \quad (3.8)$$

La viscosidad del gas corresponde a [38]:

$$\mu_g = 3.37 \cdot 10^{-7} \cdot T_g^{0.7} \quad (3.9)$$

3.1.1.3 Ecuación de conservación de energía del sólido

$$(1 - \Phi)(\rho C_p)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_{eff} \nabla T_s) + h_v(T_g - T_s) \quad (3.10)$$

La densidad del medio poroso viene dada por la densidad de las esferas de alúmina [39], que corresponde a 3950 kg/m^3 .

El calor específico del medio poroso corresponde a una regresión polinómica del comportamiento de esta propiedad a diferentes temperaturas [40]:

$$C_{p_s} = -4.833 \cdot 10^2 + 7.40773 \cdot T_s - 1.46927 \cdot 10^{-2} \cdot T_s^2 + 1.62271 \cdot 10^{-5} \cdot T_s^3 - 1.00929 \cdot 10^{-8} \cdot T_s^4 + 3.29593 \cdot 10^{-12} \cdot T_s^5 - 4.38687 \cdot 10^{-16} \cdot T_s^6 \quad (3.11)$$

Respecto de la conductividad de la fase sólida, de acuerdo con bibliografía [37,41–43] alcanza valores bastante bajos, por lo tanto, se considerará una conductividad de $0.2 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$. Sin embargo, la conductividad efectiva del medio poroso incluye la conductividad radiativa, asimismo, debe ser ponderado por el porcentaje de sólido del medio, es decir, sin considerar los poros:

$$\lambda_{eff} = (1 - \Phi) \cdot \left(\lambda_s + \frac{32 \cdot \Phi \cdot \sigma \cdot d_p \cdot T_s^3}{9 \cdot (1 - \Phi)} \right) \quad (3.12)$$

El coeficiente de transferencia de calor por convección se calcula mediante el Número de Nusselt:

$$h_v = \left(\frac{6\Phi}{d_p^2} \right) Nu_v \cdot \lambda_g \quad (3.13)$$

$$Nu_v = 2 + 1.1 \cdot Pr^{\frac{1}{3}} Re_p^{0.6} \quad (3.14)$$

El número de Prandtl y el número de Reynolds se calculan de acuerdo con las siguientes relaciones:

$$Pr = \frac{\mu_g C_{p_g}}{\lambda_g} \quad (3.15)$$

El calor específico de la mezcla gaseosa se calcula con:

$$C_{p_g} = 947 \cdot e^{1.83 \cdot 10^{-4} \cdot T_g} \quad (3.16)$$

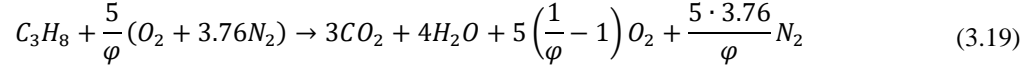
La conductividad térmica del gas se calcula con el polinomio [38]:

$$\lambda_g = 4.83 \cdot 10^{-7} \cdot C_{p_g} \cdot T_g^{0.7} \quad (3.17)$$

3.1.1.4 Ecuación de conservación de energía del gas

$$\Phi(\rho C_p)_g \frac{DT_g}{Dt} = \Phi \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) - \Phi \sum_{k=1}^{N_s} \dot{\omega}_k h_k W_k - h_v (T_g - T_s) \quad (3.18)$$

La reacción química que describe la combustión de propano será modelada de 1 paso irreversible, en presencia de exceso de aire con un 29% de Oxígeno y 71% de Nitrógeno:



La entalpía de combustión de reacción corresponde a:

$$H_c = \sum_{k=1}^{N_s} (v'_k - v''_k) (\Delta h_f^0) W_k \quad (3.20)$$

Entonces, tomando en consideración las entalpías de formación [12] y los coeficientes estequiométricos de los productos y reactantes, para la reacción (3.19) la entalpía de combustión:

$$H_c = 2044171 \text{ kJ/kmol} \quad (3.21)$$

El término fuente que representa el aporte calórico del combustible contiene la tasa de reacción de la especie $\dot{\omega}_k$, que puede ser su aparición o consumo. Tal tasa se calcula a partir del coeficiente de velocidad de reacción con la forma de Arrhenius, con exponencial de temperatura nulo. Cabe destacar que el modelo adoptado considera que el consumo de la especie está limitado por la concentración molar de combustible presente. Este modelo es adoptado de [44].

$$\dot{\omega}_k = -A_0 \nu_{C_3H_8} T_g^b e^{\left(\frac{-E_a}{R_u T_g} \right)} [C_3H_8] \quad (3.22)$$

La concentración molar de combustible viene dada por:

$$[C_3H_8] = \frac{Y_{C_3H_8} \cdot \rho_g}{W_{C_3H_8}} \quad (3.23)$$

Para la energía de activación, E_a , se elige el valor de 30 kcal/mol o 125 kJ/mol, un valor típico de hidrocarburos en el rango pobre [45]. Siguiendo el lineamiento de modelos cinéticos de [46–48] y en general para modelos de un paso irreversible, una vez con el valor de energía de activación, se selecciona un factor de frecuencia que ajuste las velocidades del frente computadas con las

experimentales. Gracias a los resultados experimentales, se traza la línea base con el reactor cilíndrico, lo que hace que el valor de A_0 sea $6 \cdot 10^7$ (1/s).

Teniendo en consideración que la reacción es de 1 paso, el valor de esta tasa será igual para todas las especies involucradas e irá variando, dependiendo de qué coeficiente estequiométrico tengan los elementos de la reacción y su peso molecular. Entonces, la ecuación (3.18) se reduce a:

$$\Phi(\rho C_p)_g \frac{DT_g}{Dt} = \Phi \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) - \Phi \dot{\omega} H_c - h_v(T_g - T_s) \quad (3.24)$$

3.1.1.5 Ecuación de conservación de la especie química

$$\frac{\partial(\rho_g Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho_g D_k \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k W_k \quad (3.25)$$

La difusión molecular de la especie es un término complejo de calcular cuando se involucra a más de 2 especies (difusión multicomponente). Sin embargo, se puede realizar una simplificación, considerando el número de Lewis [49].

$$Le = \frac{\alpha}{D_k} \quad (3.26)$$

El número de Lewis relaciona los efectos difusivos térmicos y moleculares, mostrando cuál de los dos es el que predomina. Haciendo la suposición de que este número es 1 para todas las especies, se considera que las especies y la temperatura se difunden de la misma manera, lo cual aliviana el cálculo de forma significativa.

$$D_k = \alpha = \frac{\lambda_g}{\rho_g C_{p_g}} \quad (3.27)$$

Debido a que, al considerar una reacción de 1 paso irreversible la masa de combustible consumido se traspa directamente a los productos, es que la ecuación (3.25) puede ser resuelta solamente 1 vez para la especie de propano o el combustible en cuestión, para luego calcular las especies producto por separado de acuerdo con lo consumido. En general, para un hidrocarburo en combustión con aire:

$$Y_{CO_2} = \frac{v''_{CO_2} W_{CO_2}}{W_{comb}} \cdot (Y_{comb_0} - Y_{comb}) \quad (3.28)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{v''_{H_2O} W_{H_2O}}{W_{comb}} \cdot (Y_{comb_0} - Y_{comb}) \quad (3.29)$$

$$Y_{O_2} = Y_{O_2 0} - \left(v'_{O_2} \cdot \frac{W_{O_2}}{W_{comb}} \right) \cdot (Y_{comb 0} - Y_{comb}) \quad (3.30)$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_{comb} - Y_{CO_2} - Y_{H_2O} - Y_{O_2} \quad (3.31)$$

La fracción másica inicial de combustible y de oxígeno, es decir, lo que entra al reactor:

$$Y_{comb 0} = \frac{W_{comb} \cdot v'_{comb}}{v'_{comb} \cdot W_{comb} + \frac{v'_{O_2}}{\Phi} \cdot W_{O_2} + \frac{v'_{N_2}}{\Phi} \cdot W_{N_2}} \quad (3.32)$$

$$Y_{O_2 0} = \frac{W_{O_2} \cdot v'_{O_2}}{v'_{comb} \cdot W_{comb} + \frac{v'_{O_2}}{\Phi} \cdot W_{O_2} + \frac{v'_{N_2}}{\Phi} \cdot W_{N_2}} \quad (3.33)$$

3.2 Resolución numérica

3.2.1 Mallado

3.2.1.1 Ejes de análisis, notación

El problema se analizará en dos dimensiones y con simetría en el eje central, es decir, axisimétrico, lo cual reduce de manera significativa el tiempo de cálculo. Los ejes a considerar se ilustran en la **Figura 3.1**. A z se le conocerá como eje axial y r como eje radial. Vale decir que se estará haciendo uso de coordenadas cilíndricas con ausencia de la tercera coordenada angular.

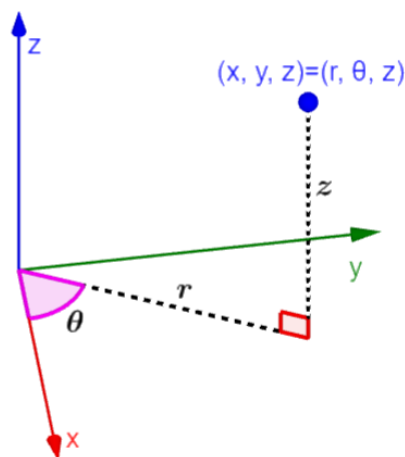


Figura 3.1: Ejes coordenados cilíndricos.

Los puntos de la malla se recorrerán con la siguiente notación:

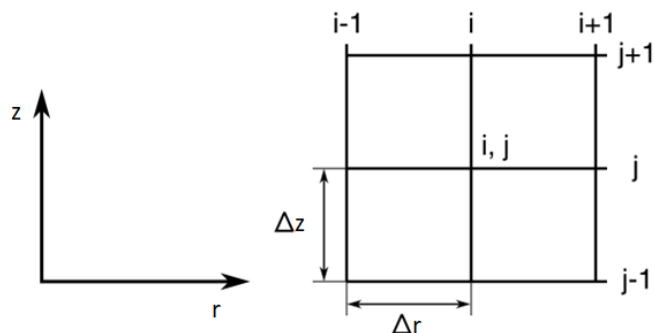


Figura 3.2: Notación de discretización en diferencias finitas.

3.2.1.2 Mallado cilíndrico

El mallado para el dominio cilíndrico se basará en una cantidad fija de nodos en cada eje. Para el eje z se tendrá un recorrido desde 1 a k y para el eje r desde 1 a m . Cabe recordar que el eje de simetría es z .

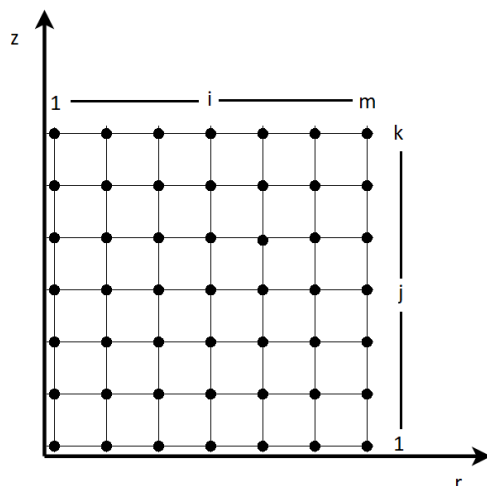


Figura 3.3: Malla en dominio cilíndrico.

3.2.1.3 Mallado cónico

El mallado cónico, dependiendo del ángulo de divergencia del reactor, debe seguir en su borde exterior la ecuación de la recta correspondiente. Esto se controlará con un contador que hará un incremento nodal en i cada vez que exista un incremento nodal en j . Vale decir que los elementos de la malla se encontrarán a una distancia distinta, por lo cual Δz será distinto a Δr . El borde inferior del reactor, es decir la entrada, tendrá “ s ” nodos de distancia desde el eje central a la pared y cada vez que aumente j , el contador que regulará la distancia a la pared derecha.

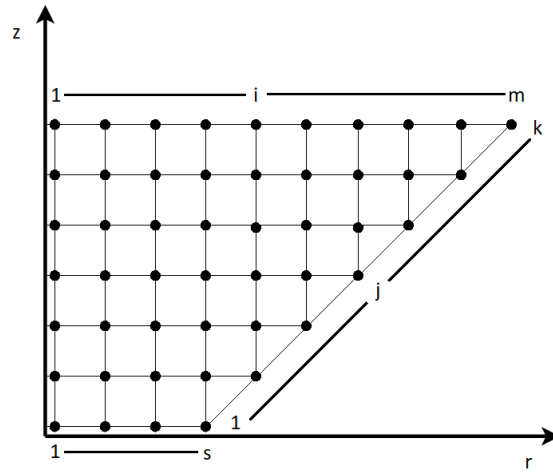


Figura 3.4: Malla en dominio divergente.

Con:

$$s = m - k + 1 \quad (3.34)$$

El arreglo que almacena el espacio entre nodos de la distancia L (el alto del reactor) es:

$$\Delta z = \frac{L}{k - 1}, \quad z = [0, \Delta z, 2\Delta z, \dots, L] \quad (3.35)$$

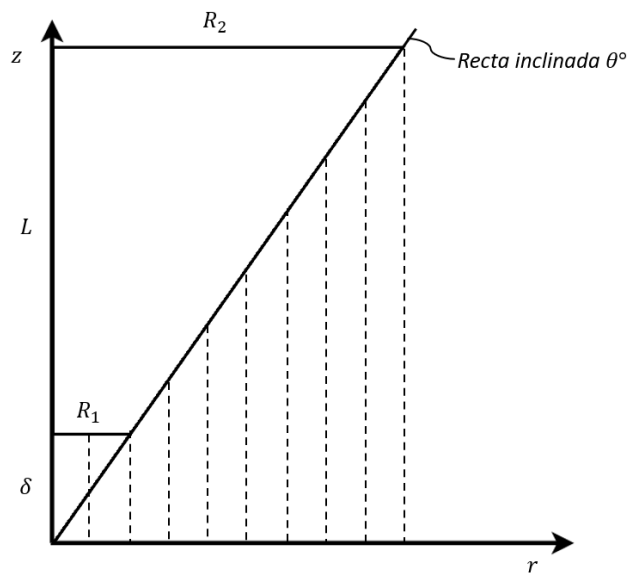


Figura 3.5: Ilustración de construcción de espaciamento radial.

La idea es que el arreglo que almacena las distancias radiales llegue desde 0 a R_2 siguiendo la ecuación de la recta condicionada por la cantidad de nodos en la distancia vertical total, esto es desde el origen hasta la distancia $L + \delta$.

En general, para cualquier ángulo de divergencia:

$$\delta = \frac{R_1 \cdot L}{R_2 - R_1} \quad (3.36)$$

$$\Delta z' = \frac{L + \delta}{m - 1}, \quad z' = [0, \Delta z', 2\Delta z', \dots, L + \delta] \quad (3.37)$$

$$r = z' \cdot \frac{R_2}{L + \delta} \quad (3.38)$$

Con:

$$r_0 = 0, \quad r_s = R_1, \quad r_m = R_2 \quad (3.39)$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} j = 1, \quad \text{contador} = s, \quad i = 1, \dots, \text{contador} \\ j = 2, \quad \text{contador} = s + 1, \quad i = 1, \dots, \text{contador} \\ \vdots \\ j = k, \quad \text{contador} = s + k = m, \quad i = 1, \dots, \text{contador} \end{aligned}$$

3.2.2 Discretización de ecuaciones gobernantes

Primeramente, se hace cálculo del campo de velocidades, para posteriormente calcular la temperatura del sólido, del gas y transporte de especies, en ese orden. La discretización de estas tres últimas ecuaciones se realiza de acuerdo con el método ADI, expuesto en el **Apéndice**, con un esquema de diferencia finita centrada en el espacio para la derivada de segundo orden y upwind en la de primer orden, respetando la dirección de la velocidad, tanto axial como radial. El esquema es adelantado en tiempo. Luego, cada sistema es resuelto mediante el algoritmo de Thomas, también presentado en el **Apéndice**. El algoritmo de resolución anterior se lleva a cabo para cada paso de tiempo.

3.2.2.1 Cálculo de velocidad por medio de funciones de corriente

La ecuación (3.1) se resolverá en su estado estacionario, es decir:

$$\nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) = 0 \quad (3.40)$$

Lo que se traduce en:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot \rho_g \cdot u_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_g u_z) = 0 \quad (3.41)$$

La definición de las velocidades en coordenadas cilíndricas como una función de corriente se define como:

$$u_r = -\frac{1}{r \rho_g} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \quad (3.42)$$

$$u_z = \frac{1}{r \rho_g} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \quad (3.43)$$

Por lo cual la ecuación (3.41) viene siendo:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) = 0 \quad (3.44)$$

Demostrando que se conserva la masa. La caída de presión a lo largo de ambas direcciones puede ser descrita mediante la ley de Forchheimer:

$$-\frac{\partial P}{\partial r} = \left(\frac{\mu}{K} + \rho_g C |\vec{u}| \right) \cdot u_r \quad (3.45)$$

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = \left(\frac{\mu}{K} + \rho_g C |\vec{u}| \right) \cdot u_z \quad (3.46)$$

Se reescriben las ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(-\frac{\partial P}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu}{K} + \rho_g C |\vec{u}| \right) \cdot u_r \right) \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left(\left(\frac{\mu}{K} + \rho_g C |\vec{u}| \right) \cdot u_z \right) \quad (3.48)$$

Restando las ecuaciones (3.47) y (3.48) y considerando:

$$\eta = \frac{\mu}{K} + \rho_g C |\vec{u}| \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(-\frac{\partial P}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} (\eta \cdot u_r) - \frac{\partial}{\partial r} (\eta \cdot u_z) = 0 \quad (3.50)$$

Reemplazando la definición en funciones de corriente para las velocidades del flujo:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \cdot \frac{1}{r \rho_g} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\eta \cdot \frac{1}{r \rho_g} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) = 0 \quad (3.51)$$

Considerando $\eta' = \eta / \rho_g$:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\eta' \partial \Psi}{r \partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\eta' \partial \Psi}{r \partial r} \right) = 0 \quad (3.52)$$

Ecuación que se puede discretizar en diferencias finitas y resolverse mediante iteración de punto fijo.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\eta'_{(i,j)} + \eta'_{(i,j+1)}}{r_{(i)} \Delta z} \cdot \frac{\Psi_{(i,j+1)} - \Psi_{(i,j)}}{\Delta z} - \frac{1}{2} \frac{\eta'_{(i,j)} + \eta'_{(i,j-1)}}{r_{(i)} \Delta z} \cdot \frac{\Psi_{(i,j)} - \Psi_{(i,j-1)}}{\Delta z} + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{\eta'_{(i,j)}}{r_{(i)}} + \frac{\eta'_{(i+1,j)}}{r_{(i+1)}} \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\Psi_{(i+1,j)} - \Psi_{(i,j)}}{\Delta r} - \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{\eta'_{(i,j)}}{r_{(i)}} + \frac{\eta'_{(i-1,j)}}{r_{(i-1)}} \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\Psi_{(i,j)} - \Psi_{(i-1,j)}}{\Delta r} = 0 \end{aligned} \quad (3.53)$$

La variable buscada es $\Psi_{(i,j)}$:

$$\Psi_{(i,j)} = \frac{a_1 \Psi_{(i,j+1)} + a_2 \Psi_{(i,j-1)} + a_3 \Psi_{(i+1,j)} + a_4 \Psi_{(i-1,j)}}{a_1 + a_2 + a_3 + a_4} \quad (3.54)$$

Las variables corresponden a:

$$a_1 = \frac{\eta'_{(i,j+1)} + \eta'_{(i,j)}}{r_{(i)} \Delta z^2} \quad (3.55)$$

$$a_2 = \frac{\eta'_{(i,j-1)} + \eta'_{(i,j)}}{r_{(i)} \Delta z^2} \quad (3.56)$$

$$a_3 = \frac{\left(\frac{\eta'_{(i+1,j)}}{r_{(i+1)}} + \frac{\eta'_{(i,j)}}{r_{(i)}} \right)}{\Delta r^2} \quad (3.57)$$

$$a_4 = \frac{\left(\frac{\eta'_{(i-1,j)}}{r_{(i-1)}} + \frac{\eta'_{(i,j)}}{r_{(i)}} \right)}{\Delta r^2} \quad (3.58)$$

3.2.2.2 Condiciones de Borde

Las condiciones de borde necesarias para la resolución de la ecuación (3.54) corresponden a:

En $r = 0$:

$$\frac{\partial u_z}{\partial r} = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\rho_g r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) = 0 \quad (3.59)$$

$$u_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0; \quad \Psi_0 = u_0 \cdot \rho_g \cdot R_0^2 \quad (3.60)$$

En $r = R$:

$$u_z = 0 \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial r} = 0 \quad (3.61)$$

$$u_r = 0 \rightarrow \Psi_R = u_0 \cdot \rho_g \cdot R^2 \quad (3.62)$$

En $z = 0$

$$u_z = u_0 \rightarrow \Psi = \frac{u_0 \cdot \rho_g \cdot r^2}{2} \quad (3.63)$$

$$u_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0 \quad (3.64)$$

En $z = L$:

$$\frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho_g \cdot r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) = 0 \quad (3.65)$$

$$u_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0 \quad (3.66)$$

Luego de encontrar el valor de la función corriente en cada nodo, se calculan las velocidades de acuerdo con las relaciones (3.42) y (3.43).

3.2.2.3 Ecuación de conservación de energía del sólido, barrido transversal

Se desarrolla la ecuación de conservación de energía del sólido en coordenadas cilíndricas:

$$(1 - \Phi)(\rho C_p)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \lambda_{ef} \cdot \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{ef} \cdot \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + h_v(T_g - T_s) \quad (3.67)$$

Con $\gamma = (1 - \Phi)(\rho C_p)_s$:

$$\begin{aligned} \gamma_{(i,j)}^n \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^n \right)}{\left(\frac{\Delta t}{2} \right)} = & \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i+1)} \lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\ & - \frac{1}{2r_i} \frac{\left(r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{ef(i-1,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j+1)}^n - T_{s(i,j)}^n \right)}{\Delta z} \\ & - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef(i,j)}^n + \lambda_{ef(i,j-1)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^n - T_{s(i,j-1)}^n \right)}{\Delta z} \\ & + h_{v(i,j)}^n \left(T_{g(i,j)}^n - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (3.68)$$

Dejando todas las variables de tiempo $n + 1/2$ a mano izquierda y n a mano derecha:

$$\begin{aligned} \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i+1)} \lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\ + \frac{1}{2r_i} \frac{\left(r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{ef(i-1,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} + h_{v(i,j)}^n T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \\ = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^n + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j+1)}^n - T_{s(i,j)}^n \right)}{\Delta z} \\ - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef(i,j)}^n + \lambda_{ef(i,j-1)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^n - T_{s(i,j-1)}^n \right)}{\Delta z} + h_{v(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n \end{aligned} \quad (3.69)$$

Agrupando términos:

$$\begin{aligned}
& T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + h_{v(i,j)}^n + \frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i+1)} \lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n \right) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{ef(i-1,j)}^n \right) \right) \\
& - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i+1)} \lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n \right) \right) \\
& - T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{ef(i-1,j)}^n \right) \right) \\
& = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^n + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{s(i,j+1)}^n - T_{s(i,j)}^n)}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j)}^n + \lambda_{ef(i,j-1)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{s(i,j)}^n - T_{s(i,j-1)}^n)}{\Delta z} + h_{v(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.70}$$

Sea:

$$\mathbf{C} = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + h_{v(i,j)}^n + \mathbf{A} + \mathbf{B} \tag{3.71}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i+1)} \lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n \right) \tag{3.72}$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i)} \lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{ef(i-1,j)}^n \right) \tag{3.73}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^n + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{s(i,j+1)}^n - T_{s(i,j)}^n)}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j)}^n + \lambda_{ef(i,j-1)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{s(i,j)}^n - T_{s(i,j-1)}^n)}{\Delta z} + h_{v(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.74}$$

Entonces:

$$T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{A} - T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{B} = \mathbf{F} \quad / \cdot (-1) \tag{3.75}$$

$$T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{A} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C} + T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{B} = -\mathbf{F} \tag{3.76}$$

Se sigue el algoritmo de Thomas, llegando finalmente a:

$$T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(i+1,j)} T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(i+1,j)} \tag{3.77}$$

Con:

$$\boldsymbol{\alpha}_{(i+1,j)} = \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_{(i,j)}} \quad (3.78)$$

$$\boldsymbol{\beta}_{(i+1,j)} = \frac{\mathbf{F} + \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_{(i,j)}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_{(i,j)}} \quad (3.79)$$

3.2.2.4 Condiciones de borde

Imponiendo la condición de borde en el eje $(1, j)$ se sabe que:

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} = 0 \quad (3.80)$$

$$T_{s(1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = T_{s(2,j)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.81)$$

Por lo tanto:

$$T_{s(1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{\alpha}_{(2,j)} T_{s(2,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \boldsymbol{\beta}_{(2,j)} \quad (3.82)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_{(2,j)} = 1 \quad (3.83)$$

$$\boldsymbol{\beta}_{(2,j)} = 0 \quad (3.84)$$

A partir de esta condición se pueden calcular todos los $\boldsymbol{\alpha}$ y $\boldsymbol{\beta}$.

Imponiendo la condición de borde en la pared (m, j) se sabe que:

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial r} = h_{wall} (T_s - T_\infty) \quad (3.85)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta r} \left(T_{s(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(m-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right) = h_{wall} \left(T_{s(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_\infty \right) \quad (3.86)$$

Sabiendo que:

$$T_{s(m-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{\alpha}_{(m,j)} T_{s(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \boldsymbol{\beta}_{(m,j)} \quad (3.87)$$

Por lo tanto, para el caso cilíndrico:

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta r} \left(T_{s(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\boldsymbol{\alpha}_{(m,j)} T_{s(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \boldsymbol{\beta}_{(m,j)} \right) \right) = h_{wall} \left(T_{s(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_\infty \right) \quad (3.88)$$

Para el caso divergente, se usa $(contador, j)$ donde el contador controla la posición sobre la pared:

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta r} \left(T_{s(contador, j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(contador-1, j)}^{n+\frac{1}{2}} \right) = h_{wall} \left(T_{s(contador, j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{\infty} \right) \quad (3.89)$$

Sabiendo que:

$$T_{s(contador-1, j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(contador, j)} T_{s(contador, j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(contador, j)} \quad (3.90)$$

Por lo tanto, para el caso divergente:

$$\begin{aligned} -\frac{\lambda_{ef}}{\Delta r} \left(T_{s(contador, j)}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\alpha_{(contador, j)} T_{s(contador, j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(contador, j)} \right) \right) \\ = h_{wall} \left(T_{s(contador, j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{\infty} \right) \end{aligned} \quad (3.91)$$

Resolviendo la ecuación no lineal que se forma en ambos casos se obtiene fácilmente la temperatura de los nodos de la pared. A partir de esta condición en el borde se puede hacer cálculo de la temperatura de todos los nodos interiores, para luego imponer las condiciones de borde correspondientes.

Temperatura en la salida (i, k) :

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial z} = h_{out} \left(T_{s(i, k)} - T_{\infty} \right) + \varepsilon \sigma \left(T_{s(i, k)}^4 - T_{\infty}^4 \right) \quad (3.92)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta z} \left(T_{s(i, k)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i, k-1)}^{n+\frac{1}{2}} \right) = h_{out} \left(T_{s(i, k)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{\infty} \right) + \varepsilon \sigma \left(T_{s(i, k)}^{n+\frac{1}{2} 4} - T_{\infty}^4 \right) \quad (3.93)$$

Resolviendo la ecuación no lineal se obtiene fácilmente la temperatura en la salida.

Condición de borde en la entrada $(i, 1)$:

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial z} = h_{out} \left(T_{s(i, 1)} - T_{\infty} \right) \quad (3.94)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta z} \left(T_{s(i, 1)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i, 2)}^{n+\frac{1}{2}} \right) = h_{out} \left(T_{s(i, 1)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{\infty} \right) \quad (3.95)$$

Despejando $T_{s(i, 1)}^{n+\frac{1}{2}}$ se obtiene la temperatura a la entrada para el medio sólido.

3.2.2.5 Ecuación de conservación de energía del sólido, barrido axial

Con $\gamma = (1 - \Phi)(\rho C_p)_s$:

$$\begin{aligned}
 \gamma_{(i,j)}^n \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+1} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)} &= \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i+1)}\lambda_{ef}^n + r_{(i)}\lambda_{ef}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} \\
 &\quad - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i)}\lambda_{ef}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef}^n + \lambda_{ef}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j+1)}^{n+1} - T_{s(i,j)}^{n+1}\right)}{\Delta z} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef}^n + \lambda_{ef}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+1} - T_{s(i,j-1)}^{n+1}\right)}{\Delta z} \\
 &\quad + h_{v(i,j)}^n \left(T_{g(i,j)}^n - T_{s(i,j)}^{n+1}\right)
 \end{aligned} \tag{3.96}$$

Dejando todas las variables de tiempo $n + 1$ a mano izquierda y $n + \frac{1}{2}$ a mano derecha:

$$\begin{aligned}
 \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^{n+1} - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef}^n + \lambda_{ef}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j+1)}^{n+1} - T_{s(i,j)}^{n+1}\right)}{\Delta z} \\
 + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{ef}^n + \lambda_{ef}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+1} - T_{s(i,j-1)}^{n+1}\right)}{\Delta z} + h_{v(i,j)}^n T_{s(i,j)}^{n+1} \\
 = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i+1)}\lambda_{ef}^n + r_{(i)}\lambda_{ef}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} \\
 - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i)}\lambda_{ef}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} + h_{v(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n
 \end{aligned} \tag{3.97}$$

Agrupando términos:

$$\begin{aligned}
& T_{s(i,j)}^{n+1} \left(\frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + h_{v(i,j)}^n + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta z^2} + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j)}^n + \lambda_{ef(i,j-1)}^n)}{\Delta z^2} \right) \\
& - T_{s(i,j-1)}^{n+1} \left(\frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j)}^n + \lambda_{ef(i,j-1)}^n)}{\Delta z^2} \right) - T_{s(i,j+1)}^{n+1} \left(\frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta z^2} \right) \\
& = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} \cdot T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{(r_{(i+1)}\lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} \\
& - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{(r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef(i-1,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} + h_{v(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.98}$$

Sea:

$$\mathbf{C} = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + h_{v(i,j)}^n + \mathbf{A} + \mathbf{B} \tag{3.99}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta z^2} \tag{3.100}$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{ef(i,j+1)}^n + \lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta z^2} \tag{3.101}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{(r_{(i+1)}\lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{s(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} \\
& - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{(r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef(i-1,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{s(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} + h_{v(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.102}$$

Entonces:

$$T_{s(i,j)}^{n+1} \mathbf{C} - T_{s(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{A} - T_{s(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{B} = \mathbf{F} \quad / \cdot (-1) \tag{3.103}$$

$$T_{s(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{A} - T_{s(i,j)}^{n+1} \mathbf{C} + T_{s(i,j+1)}^{n+1} \mathbf{B} = -\mathbf{F} \tag{3.104}$$

Se sigue el algoritmo de Thomas, llegando finalmente a:

$$T_{s(i,j)}^{n+1} = \alpha_{(i,j+1)} T_{s(i,j+1)}^{n+1} + \beta_{(i,j+1)} \tag{3.105}$$

Con:

$$\alpha_{(i,j+1)} = \frac{B}{C - A\alpha_{(i,j)}} \quad (3.106)$$

$$\beta_{(i,j+1)} = \frac{F + A\beta_{(i,j)}}{C - A\alpha_{(i,j)}} \quad (3.107)$$

3.2.2.6 Condiciones de borde

Imponiendo la condición de borde en la entrada, se sabe que:

$$T_{s(i,1)}^{n+1} = \alpha_{(i,2)} T_{s(i,2)}^{n+1} + \beta_{(i,2)} \quad (3.108)$$

Se puede calcular la temperatura en la entrada haciendo uso de la temperatura $T_{s(i,2)}$ del tiempo anterior:

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial Z} = h_{in} (T_{s(i,1)} - T_{\infty}) \quad (3.109)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta Z} \left(T_{s(i,1)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,2)}^{n+\frac{1}{2}} \right) = h_{in} \left(T_{s(i,1)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{\infty} \right) \quad (3.110)$$

Entonces:

$$\alpha_{(i,2)} = 0 \quad (3.111)$$

$$\beta_{(i,2)} = T_{s(i,1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.112)$$

A partir de esta condición se pueden calcular todos los α y β para el caso cilíndrico. Para el caso divergente, debido a que el barrido es axial comenzando desde abajo, se necesitan α y β que cumplan con las condiciones de los nodos de la pared, por lo tanto:

$$T_{s(\text{contador},j)}^{n+1} = \alpha_{(\text{contador},j+1)} T_{s(\text{contador},j+1)}^{n+1} + \beta_{(\text{contador},j+1)} \quad (3.113)$$

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial r} = h_{wall} (T_{s(\text{contador},j)} - T_{\infty}) \quad (3.114)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta r} \left(T_{s(\text{contador},j)}^{n+1} - T_{s(\text{contador}-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right) = h_{wall} (T_{s(\text{contador},j)}^{n+1} - T_{\infty}) \quad (3.115)$$

Entonces:

$$\alpha_{(\text{contador},j+1)} = 0 \quad (3.116)$$

$$\beta_{(\text{contador},j+1)} = T_{s(\text{contador},j)}^{n+1} \quad (3.117)$$

Siendo el contador la posición sobre la pared.

Aplicando la condición de borde en la salida:

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial Z} = h_{out} (T_{s(i,k)} - T_\infty) + \varepsilon \sigma (T_{s(i,k)}^4 - T_\infty^4) \quad (3.118)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta Z} (T_{s(i,k)}^{n+1} - T_{s(i,k-1)}^{n+1}) = h_{out} (T_{s(i,k)}^{n+1} - T_\infty) + \varepsilon \sigma (T_{s(i,k)}^{n+1,4} - T_\infty^4) \quad (3.119)$$

Resolviendo tal ecuación se obtiene fácilmente la temperatura a la salida. A partir de esta condición en el borde se puede hacer cálculo de la temperatura de todos los nodos interiores, para luego imponer las condiciones de borde correspondientes.

Condición sobre el eje (simetría):

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} = 0 \quad (3.120)$$

$$T_{s(1,j)}^{n+1} = T_{s(2,j)}^{n+1} \quad (3.121)$$

Condición de borde en la pared:

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial r} = h_{wall} (T_{s(m,j)} - T_\infty) \quad (3.122)$$

$$-\frac{\lambda_{ef}}{\Delta r} (T_{s(m,j)}^{n+1} - T_{s(m-1,j)}^{n+1}) = h_{wall} (T_{s(m,j)}^{n+1} - T_\infty) \quad (3.123)$$

Resolviendo tal ecuación se obtiene la temperatura en la pared para el caso cilíndrico. Para el caso cónico, la condición en la pared ya fue resuelta con el cálculo de α y β .

3.2.2.7 Ecuación de conservación de energía del gas, barrido transversal

Se desarrolla la ecuación de conservación de energía del gas:

$$\begin{aligned} (\rho C_p)_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + u_r \frac{\partial T_g}{\partial r} + u_z \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_g \cdot \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_g \cdot \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) - \dot{\omega}_k h_k W_k - \frac{h_v}{\Phi} (T_g - T_s) \end{aligned} \quad (3.124)$$

Cabe destacar, que debido a que se usa un esquema upwind, este debe ir discretizado en la misma dirección que la componente de velocidad radial, por lo cual se considerará un término adicional en la discretización para compensar tal efecto. Para la componente en z, se considera un esquema centrado.

Con $\gamma = (\rho C_p)_g$:

$$\begin{aligned}
& \gamma_{(i,j)}^n \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^n\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)} + \gamma_{(i,j)}^n \left(u_{r(i,j)}^n + \left|u_{r(i,j)}^n\right|\right) \cdot \frac{T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} \\
& + \gamma_{(i,j)}^n \left(u_{r(i,j)}^n - \left|u_{r(i,j)}^n\right|\right) \cdot \frac{T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} \\
& + \gamma_{(i,j)}^n \cdot u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j-1)}^n}{2\Delta z} \\
& = \frac{1}{2r(i)} \frac{\left(r_{(i+1)}\lambda_{g(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} \\
& - \frac{1}{2r(i)} \frac{\left(r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{g(i-1,j)}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} \\
& + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j)}^n\right)}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^n - T_{g(i,j-1)}^n\right)}{\Delta z} - \dot{\omega}_k h_k W_k - \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} \left(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{s(i,j)}^n\right)
\end{aligned} \tag{3.125}$$

Dejando todas las variables de tiempo $n + 1/2$ a mano izquierda y n a mano derecha:

$$\begin{aligned}
& \gamma_{(i,j)}^n \frac{2T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \gamma_{(i,j)}^n \left(u_{r(i,j)}^n + \left|u_{r(i,j)}^n\right|\right) \cdot \frac{T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} \\
& + \gamma_{(i,j)}^n \left(u_{r(i,j)}^n - \left|u_{r(i,j)}^n\right|\right) \cdot \frac{T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} \\
& - \frac{1}{2r(i)} \frac{\left(r_{(i+1)}\lambda_{g(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} \\
& + \frac{1}{2r(i)} \frac{\left(r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{g(i-1,j)}^n\right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}\right)}{\Delta r} + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \\
& = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j)}^n\right)}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n\right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^n - T_{g(i,j-1)}^n\right)}{\Delta z} - \gamma_{(i,j)}^n u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j-1)}^n}{2\Delta z} \\
& - \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{s(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.126}$$

Agrupando términos:

$$\begin{aligned}
& T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} + \frac{u_{r(i,j)}^n + |u_{r(i,j)}^n|}{2\Delta r} - \frac{u_{r(i,j)}^n - |u_{r(i,j)}^n|}{2\Delta r} \right) \\
& + \frac{1}{2r_{(i)}\Delta r^2} \left(r_{(i+1)}\lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n \right) + \frac{1}{2r_{(i)}\Delta r^2} \left(r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef(i-1,j)}^n \right) \\
& - T_{g(i,j-1)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{r(i,j)}^n + |u_{r(i,j)}^n|}{2\Delta r} + \frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i+1)}\lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n \right) \right) \\
& - T_{g(i,j+1)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{r_{(i)}} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef(i-1,j)}^n \right) - \frac{u_{r(i,j)}^n - |u_{r(i,j)}^n|}{2\Delta r} \right) \\
& = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j)}^n)}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{g(i,j)}^n - T_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z} - \gamma_{(i,j)}^n u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j-1)}^n}{2\Delta z} \\
& - \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{s(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.127}$$

Sea:

$$\mathbf{C} = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} + \mathbf{A} + \mathbf{B} \tag{3.128}$$

$$\mathbf{A} = \frac{u_{r(i,j)}^n + |u_{r(i,j)}^n|}{2\Delta r} + \frac{1}{2r_{(i)}\Delta r^2} \left(r_{(i+1)}\lambda_{ef(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n \right) \tag{3.129}$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2r_{(i)}\Delta r^2} \left(r_{(i)}\lambda_{ef(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{ef(i-1,j)}^n \right) - \frac{u_{r(i,j)}^n - |u_{r(i,j)}^n|}{2\Delta r} \tag{3.130}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{g(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j)}^n)}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z} \cdot \frac{(T_{g(i,j)}^n - T_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z} - \gamma_{(i,j)}^n u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i,j+1)}^n - T_{g(i,j-1)}^n}{2\Delta z} \\
& - \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{s(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.131}$$

Entonces:

$$T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{A} - T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{B} = \mathbf{F} \quad / \cdot (-1) \tag{3.132}$$

$$T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{A} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C} + T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{B} = -\mathbf{F} \tag{3.133}$$

Se sigue el algoritmo de Thomas, llegando finalmente a:

$$T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(i+1,j)} T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(i+1,j)} \quad (3.134)$$

Con:

$$\alpha_{(i+1,j)} = \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\alpha_{(i,j)}} \quad (3.135)$$

$$\beta_{(i+1,j)} = \frac{\mathbf{F} + \mathbf{A}\beta_{(i,j)}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\alpha_{(i,j)}} \quad (3.136)$$

3.2.2.8 Condiciones de Borde

Imponiendo la condición de borde en el eje de simetría (1, j) se sabe que:

$$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0 \quad (3.137)$$

$$T_{g(1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = T_{g(2,j)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.138)$$

Por lo tanto:

$$T_{g(1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(2,j)} T_{g(2,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(2,j)} \quad (3.139)$$

$$\alpha_{(2,j)} = 1 \quad (3.140)$$

$$\beta_{(2,j)} = 0 \quad (3.141)$$

A partir de esta condición se pueden calcular todos los α y β .

Imponiendo la condición de borde sobre la pared (m , j) se sabe que:

$$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0 \quad (3.142)$$

Entonces, para el caso cilíndrico:

$$T_{g(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} = T_{g(m-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.143)$$

$$T_{g(m-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(m,j)} T_{g(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(m,j)} \quad (3.144)$$

Reemplazando:

$$T_{g(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(m,j)} T_{g(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(m,j)} \quad (3.145)$$

Por lo que:

$$T_{g(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{(m,j)}}{1 - \alpha_{(m,j)}} \quad (3.146)$$

En el caso divergente, ya que la pared está inclinada, la condición (3.142) se transforma en:

$$\frac{\partial T_g}{\partial n} = 0 \quad (3.147)$$

Lo cual viene siendo una derivada normal a la pared. Esto significa que la temperatura en la pared se aproximará a la temperatura del nodo normal a esta, pero del tiempo anterior.

$$T_{g(\text{contador},j)}^{n+\frac{1}{2}} = T_{g(\text{contador}-1,j+1)}^n \quad (3.148)$$

A partir de esta condición en el borde se puede hacer cálculo de la temperatura de todos los nodos interiores, para luego imponer las condiciones de borde correspondientes.

A la salida (i, k) :

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} = 0 \quad (3.149)$$

Entonces:

$$T_{g(i,k)}^{n+\frac{1}{2}} = T_{g(i,k-1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.150)$$

A la entrada $(i, 1)$:

$$T_{g(i,1)}^{n+\frac{1}{2}} = T_\infty = 300 \text{ K} \quad (3.151)$$

3.2.2.9 Ecuación de conservación de energía del gas, barrido axial

Con $\gamma = (\rho C_p)_g$:

$$\begin{aligned}
 \gamma_{(i,j)}^n & \left(\frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+1} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\left(\frac{\Delta t}{2} \right)} + u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} + u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i,j+1)}^{n+1} - T_{g(i,j)}^{n+1}}{\Delta z} \right) \\
 & = \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i+1)}\lambda_{g(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\
 & - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{g(i-1,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j+1)}^{n+1} - T_{g(i,j)}^{n+1} \right)}{\Delta z} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+1} - T_{g(i,j-1)}^{n+1} \right)}{\Delta z} \\
 & - \dot{\omega}_k h_k W_k - \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} \left(T_{g(i,j)}^{n+1} - T_{s(i,j)}^n \right)
 \end{aligned} \tag{3.152}$$

Dejando todas las variables de tiempo $n + 1$ a mano izquierda y $n + \frac{1}{2}$ a mano derecha:

$$\begin{aligned}
 2\gamma_{(i,j)}^n \frac{T_{g(i,j)}^{n+1}}{\Delta t} + \gamma_{(i,j)}^n u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i,j+1)}^{n+1} - T_{g(i,j)}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j+1)}^{n+1} - T_{g(i,j)}^{n+1} \right)}{\Delta z} \\
 + \frac{1}{2} \frac{\left(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n \right)}{\Delta z} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+1} - T_{g(i,j-1)}^{n+1} \right)}{\Delta z} + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{g(i,j)}^{n+1} \\
 = \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i+1)}\lambda_{g(i+1,j)}^n + r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\
 - \frac{1}{2r_{(i)}} \frac{\left(r_{(i)}\lambda_{g(i,j)}^n + r_{(i-1)}\lambda_{g(i-1,j)}^n \right)}{\Delta r} \cdot \frac{\left(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta r} \\
 + \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \gamma_{(i,j)}^n u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} - \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{s(i,j)}^n
 \end{aligned} \tag{3.153}$$

Agrupando términos:

$$\begin{aligned}
& T_{g(i,j)}^{n+1} \left(\frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} - \frac{\gamma_{(i,j)}^n u_{z(i,j)}^n}{\Delta z} + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta z^2} + \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z^2} \right) \\
& - T_{g(i,j-1)}^{n+1} \left(\frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z^2} \right) - T_{g(i,j+1)}^{n+1} \left(\frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta z^2} \right) \\
& = \frac{1}{2r(i)} \frac{(r_{(i+1)} \lambda_{g(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} \\
& - \frac{1}{2r(i)} \frac{(r_{(i)} \lambda_{g(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{g(i-1,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} + \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \\
& - \gamma_{(i,j)}^n u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} - \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{s(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.154}$$

Sea:

$$\mathbf{C} = \frac{2\gamma_{(i,j)}^n}{\Delta t} + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} + \mathbf{A} + \mathbf{B} \tag{3.155}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j)}^n + \lambda_{g(i,j-1)}^n)}{\Delta z^2} \tag{3.156}$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2} \frac{(\lambda_{g(i,j+1)}^n + \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta z^2} \tag{3.157}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \frac{1}{2r(i)} \frac{(r_{(i+1)} \lambda_{g(i+1,j)}^n + r_{(i)} \lambda_{g(i,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} \\
& - \frac{1}{2r(i)} \frac{(r_{(i)} \lambda_{g(i,j)}^n + r_{(i-1)} \lambda_{g(i-1,j)}^n)}{\Delta r} \cdot \frac{(T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}})}{\Delta r} + \frac{2\gamma_{(i,j)}^n T_{g(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \\
& - \gamma_{(i,j)}^n u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{T_{g(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{g(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} - \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{h_{v(i,j)}^n}{\Phi} T_{s(i,j)}^n
\end{aligned} \tag{3.158}$$

Entonces:

$$T_{g(i,j)}^{n+1} \mathbf{C} - T_{g(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{A} - T_{g(i,j+1)}^{n+1} \mathbf{B} = \mathbf{F} \quad / \cdot (-1) \tag{3.159}$$

$$T_{g(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{A} - T_{g(i,j)}^{n+1} \mathbf{C} + T_{g(i,j+1)}^{n+1} \mathbf{B} = -\mathbf{F} \tag{3.160}$$

Se sigue el algoritmo de Thomas, llegando finalmente a:

$$T_{g(i,j)}^{n+1} = \alpha_{(i,j+1)} T_{g(i,j+1)}^{n+1} + \beta_{(i,j+1)} \quad (3.161)$$

Con:

$$\alpha_{(i,j+1)} = \frac{B}{C - A\alpha_{(i,j)}} \quad (3.162)$$

$$\beta_{(i,j+1)} = \frac{F + A\beta_{(i,j)}}{C - A\alpha_{(i,j)}} \quad (3.163)$$

3.2.2.10 Condiciones de borde

Sabiendo que la condición de borde a la entrada es:

$$T_{g(i,1)}^{n+1} = T_{\infty} = 300 K \quad (3.164)$$

Se tiene que:

$$T_{g(i,1)}^{n+1} = \alpha_{(i,2)} T_{g(i,2)}^{n+1} + \beta_{(i,2)} \quad (3.165)$$

$$\alpha_{(i,2)} = 0 \quad (3.166)$$

$$\beta_{(i,2)} = T_{\infty} = 300 K \quad (3.167)$$

A partir de esta condición se pueden calcular todos los α y β de los nodos interiores en el caso cilíndrico. En adición a esta condición, en el caso divergente, se necesita conocer la condición de los nodos adyacentes a la pared:

$$T_{g(\text{contador},j)}^{n+1} = \alpha_{(\text{contador},j+1)} T_{g(\text{contador},j+1)}^{n+1} + \beta_{(\text{contador},j+1)} \quad (3.168)$$

Siguiendo la condición de borde:

$$\frac{\partial T_g}{\partial n} = 0 \quad (3.169)$$

$$T_{g(\text{contador},j)}^{n+1} = T_{g(\text{contador}-1,j+1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.170)$$

Se obtiene:

$$\alpha_{(\text{contador},j+1)} = 0 \quad (3.171)$$

$$\beta_{(contador,j+1)} = T_{g(contador-1,j+1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.172)$$

Notar que como la temperatura del gas debe ser aislada en la pared, la única manera de que se cumpla tal condición es que la temperatura en el tiempo $n + 1$ sea igual a la temperatura del nodo vecino, pero en el tiempo $n + 1/2$.

Aplicando la condición de borde en la salida (i, k) :

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} = 0 \quad (3.173)$$

Entonces:

$$T_{g(i,k)}^{n+1} = T_{g(i,k-1)}^{n+1} \quad (3.174)$$

$$T_{g(i,k-1)}^{n+1} = \alpha_{(i,k)} T_{g(i,k)}^{n+1} + \beta_{(i,k)} \quad (3.175)$$

Reemplazando:

$$T_{g(i,k)}^{n+1} = \alpha_{(i,k)} T_{g(i,k)}^{n+1} + \beta_{(i,k)} \quad (3.176)$$

Por lo que:

$$T_{g(k,j)}^{n+1} = \frac{\beta_{(k,j)}}{1 - \alpha_{(k,j)}} \quad (3.177)$$

A partir de esta condición en el borde se puede hacer cálculo de la temperatura de todos los nodos interiores, para luego imponer las condiciones de borde correspondientes.

Condición sobre el eje (simetría):

$$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0 \quad (3.178)$$

$$T_{g(1,j)}^{n+1} = T_{g(2,j)}^{n+1} \quad (3.179)$$

Condición de borde en la pared en caso cilíndrico:

$$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0 \quad (3.180)$$

$$T_{g(m,j)}^{n+1} = T_{g(m-1,j)}^{n+1} \quad (3.181)$$

La condición de borde en la pared en caso divergente ya fue resuelta con los α y β .

3.2.2.11 Ecuación de conservación de la especie, barrido transversal

Desarrollando la ecuación de conservación de la especie:

$$\rho_g \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho_g u_r \frac{\partial Y_k}{\partial r} + \rho_g u_z \frac{\partial Y_k}{\partial z} = \frac{1}{r} \left(r D_k \rho_g \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_k \rho_g \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial z} \right) + \dot{\omega} W_k \quad (3.182)$$

Considerando $D_k' = D_k \cdot \rho_g$:

$$\begin{aligned} & \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^n}{\frac{\Delta t}{2}} + \left(u_{r(i,j)}^n + |u_{r(i,j)}^n| \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} \\ & + \left(u_{r(i,j)}^n - |u_{r(i,j)}^n| \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} + u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^n - Y_{k(i,j-1)}^n}{2\Delta z} \\ & = \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i+1)}D_{k(i+1,j)}^m + r_{(i)}D_{k(i,j)}^m}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\ & - \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i)}D_{k(i,j)}^m + r_{(i-1)}D_{k(i-1,j)}^m}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\ & + \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_{k(i,j+1)}^m + D_{k(i,j)}^m}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^n - Y_{k(i,j)}^n}{\Delta z} \\ & - \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_{k(i,j)}^m + D_{k(i,j-1)}^m}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^n - Y_{k(i,j-1)}^n}{\Delta z} + \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} W_k}{\rho_{g(i,j)}^n} \end{aligned} \quad (3.183)$$

Dejando todas las variables de tiempo $n + 1/2$ a mano izquierda y n a mano derecha:

$$\begin{aligned} & \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \left(u_{r(i,j)}^n + |u_{r(i,j)}^n| \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} + \left(u_{r(i,j)}^n - |u_{r(i,j)}^n| \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} \\ & - \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i+1)}D_{k(i+1,j)}^m + r_{(i)}D_{k(i,j)}^m}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\ & + \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i)}D_{k(i,j)}^m + r_{(i-1)}D_{k(i-1,j)}^m}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} - \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} W_k}{\rho_{g(i,j)}^n} \\ & = \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} Y_{k(i,j)}^n + \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_{k(i,j+1)}^m + D_{k(i,j)}^m}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^n - Y_{k(i,j)}^n}{\Delta z} \end{aligned} \quad (3.184)$$

$$-\frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m(i,j) + D_k^m(i,j-1)}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j) - Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j-1)}{\Delta z} - u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{Y_k^n(i,j+1) - Y_k^n(i,j-1)}{2\Delta z}$$

Agrupando términos:

$$\begin{aligned} & Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j) \left(\frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^n W_k}{\rho_{g(i,j)}^n} + \frac{(u_r^n(i,j) + |u_r^n(i,j)|)}{2\Delta r} - \frac{(u_r^n(i,j) - |u_r^n(i,j)|)}{2\Delta r} \right) \\ & + \frac{1}{r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(\frac{r_{(i+1)}D_k^m(i+1,j) + r_{(i)}D_k^m(i,j)}{\Delta r} \right) \\ & + \frac{1}{r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \frac{1}{2\Delta r^2} \left(\frac{r_{(i)}D_k^m(i,j) + r_{(i-1)}D_k^m(i-1,j)}{\Delta r} \right) \\ & - Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i-1,j) \left(\frac{(u_r^n(i,j) + |u_r^n(i,j)|)}{2\Delta r} + \frac{1}{r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \frac{1}{2\Delta r^2} (r_{(i)}D_k^m(i,j) + r_{(i-1)}D_k^m(i-1,j)) \right) \\ & - Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i+1,j) \left(\frac{(u_r^n(i,j) - |u_r^n(i,j)|)}{2\Delta r} + \frac{1}{r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \frac{1}{2\Delta r^2} (r_{(i+1)}D_k^m(i+1,j) + r_{(i)}D_k^m(i,j)) \right) \\ & = \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} Y_k^n(i,j) + \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m(i,j+1) + D_k^m(i,j)}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_k^n(i,j+1) - Y_k^n(i,j)}{\Delta z} \\ & - \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m(i,j) + D_k^m(i,j-1)}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j) - Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j-1)}{\Delta z} - u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{Y_k^n(i,j+1) - Y_k^n(i,j-1)}{2\Delta z} \end{aligned} \quad (3.185)$$

Sea:

$$\mathbf{C} = \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^n W_k}{\rho_{g(i,j)}^n} + \mathbf{A} + \mathbf{B} \quad (3.186)$$

$$\mathbf{A} = \frac{(u_r^n(i,j) + |u_r^n(i,j)|)}{2\Delta r} + \frac{1}{r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \frac{1}{2\Delta r^2} (r_{(i)}D_k^m(i,j) + r_{(i-1)}D_k^m(i-1,j)) \quad (3.187)$$

$$\mathbf{B} = \frac{(u_r^n(i,j) - |u_r^n(i,j)|)}{2\Delta r} + \frac{1}{r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \frac{1}{2\Delta r^2} (r_{(i+1)}D_k^m(i+1,j) + r_{(i)}D_k^m(i,j)) \quad (3.188)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} Y_k^n(i,j) + \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m(i,j+1) + D_k^m(i,j)}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_k^n(i,j+1) - Y_k^n(i,j)}{\Delta z} \\ & - \frac{1}{2\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m(i,j) + D_k^m(i,j-1)}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j) - Y_k^{n+\frac{1}{2}}(i,j-1)}{\Delta z} - u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{Y_k^n(i,j+1) - Y_k^n(i,j-1)}{2\Delta z} \end{aligned} \quad (3.189)$$

Entonces:

$$Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{A} - Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{B} = \mathbf{F} \quad / \cdot (-1) \quad (3.190)$$

$$Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{A} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C} + Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{B} = -\mathbf{F} \quad (3.191)$$

Se sigue el algoritmo de Thomas, llegando finalmente a:

$$Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(i+1,j)} Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(i+1,j)} \quad (3.192)$$

Con:

$$\alpha_{(i+1,j)} = \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\alpha_{(i,j)}} \quad (3.193)$$

$$\beta_{(i+1,j)} = \frac{\mathbf{F} + \mathbf{A}\beta_{(i,j)}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\alpha_{(i,j)}} \quad (3.194)$$

3.2.2.12 Condiciones de Borde

Imponiendo la condición de borde en el eje $(1, j)$ se sabe que:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0 \quad (3.195)$$

$$Y_{k(1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = Y_{k(2,j)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.196)$$

Por lo tanto:

$$Y_{k(1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(2,j)} Y_{k(2,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(2,j)} \quad (3.197)$$

$$\alpha_{(2,j)} = 1 \quad (3.198)$$

$$\beta_{(2,j)} = 0 \quad (3.199)$$

A partir de esta condición se pueden calcular todos los α y β . Imponiendo la condición de borde sobre la pared (m, j) en el dominio cilíndrico, se sabe que:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0 \quad (3.200)$$

Entonces:

$$Y_{k(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} = Y_{k(m-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.201)$$

$$Y_{k(m-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(m,j)} Y_{k(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(m,j)} \quad (3.202)$$

Reemplazando:

$$Y_{k(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_{(m,j)} Y_{k(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_{(m,j)} \quad (3.203)$$

Por lo que:

$$Y_{k(m,j)}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{(m,j)}}{1 - \alpha_{(m,j)}} \quad (3.204)$$

Para el dominio divergente:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial n} = 0 \quad (3.205)$$

$$Y_{k(\text{contador},j)}^{n+\frac{1}{2}} = Y_{k(\text{contador}-1,j+1)}^n \quad (3.206)$$

Esto significa que la fracción másica en la pared se aproximará a la fracción del nodo normal a esta, pero del tiempo anterior. A partir de esta condición en el borde se puede hacer cálculo de la fracción másica de todos los nodos interiores, para luego imponer las condiciones de borde correspondientes.

A la salida (i, k) :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial z} = 0 \quad (3.207)$$

$$Y_{k(i,k)}^{n+\frac{1}{2}} = Y_{k(i,k-1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.208)$$

A la entrada $(i, 1)$:

$$Y_{k(i,1)}^{n+\frac{1}{2}} = Y_0 \quad (3.209)$$

3.2.2.13 Ecuación de conservación de la especie, barrido axial

$$\begin{aligned}
& 2\rho g_{(i,j)}^n \frac{Y_{k(i,j)}^{n+1} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r} + u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^{n+1} - Y_{k(i,j)}^{n+1}}{\Delta z} \\
&= \frac{1}{2r_{(i)}\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i+1)}D_k^m{}_{(i+1,j)} + r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\
&\quad - \frac{1}{2r_{(i)}\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)} + r_{(i-1)}D_k^m{}_{(i-1,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\
&\quad + \frac{1}{2\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m{}_{(i,j+1)} + D_k^m{}_{(i,j)}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^{n+1} - Y_{k(i,j)}^{n+1}}{\Delta z} \\
&\quad - \frac{1}{2\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m{}_{(i,j)} + D_k^m{}_{(i,j-1)}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} + \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^{n+1}W_k}{\rho g_{(i,j)}^n}
\end{aligned} \tag{3.210}$$

Dejando todas las variables de tiempo $n + 1$ a mano izquierda y $n + 1/2$ a mano derecha:

$$\begin{aligned}
& \frac{2\rho g_{(i,j)}^n}{\Delta t} Y_{k(i,j)}^{n+1} + u_{z(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^{n+1} - Y_{k(i,j)}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{1}{2\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m{}_{(i,j+1)} + D_k^m{}_{(i,j)}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j+1)}^{n+1} - Y_{k(i,j)}^{n+1}}{\Delta z} \\
&+ \frac{1}{2\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{D_k^m{}_{(i,j)} + D_k^m{}_{(i,j-1)}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^{n+1}W_k}{\rho g_{(i,j)}^n} \\
&= \frac{2\rho g_{(i,j)}^n}{\Delta t} Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2r_{(i)}\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i+1)}D_k^m{}_{(i+1,j)} + r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\
&\quad - \frac{1}{2r_{(i)}\rho g_{(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)} + r_{(i-1)}D_k^m{}_{(i-1,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} - u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r}
\end{aligned} \tag{3.211}$$

Agrupando términos:

$$\begin{aligned}
& Y_{k(i,j)}^{n+1} \left(\frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^n W_k}{\rho_{g(i,j)}^n} - \frac{u_{z(i,j)}^n}{\Delta z} + \frac{1}{2\Delta z^2 \rho_{g(i,j)}^n} (D_k^m{}_{(i,j+1)} + D_k^m{}_{(i,j)}) \right) \\
& \quad + \frac{1}{2\Delta z^2 \rho_{g(i,j)}^n} (D_k^m{}_{(i,j)} + D_k^m{}_{(i,j-1)}) \\
& - Y_{k(i,j-1)}^{n+1} \left(\frac{1}{2\Delta z^2 \rho_{g(i,j)}^n} (D_k^m{}_{(i,j)} + D_k^m{}_{(i,j-1)}) \right) \\
& - Y_{k(i,j+1)}^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2\Delta z^2 \rho_{g(i,j)}^n} (D_k^m{}_{(i,j+1)} + D_k^m{}_{(i,j)}) - \frac{u_{z(i,j)}^n}{\Delta z} \right) \\
& = \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i+1)}D_k^m{}_{(i+1,j)} + r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\
& \quad - \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)} + r_{(i-1)}D_k^m{}_{(i-1,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} - u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r}
\end{aligned} \tag{3.212}$$

Sea:

$$\mathbf{C} = \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\omega}_{(i,j)}^n W_k}{\rho_{g(i,j)}^n} + \mathbf{A} + \mathbf{B} \tag{3.213}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2\Delta z^2 \rho_{g(i,j)}^n} (D_k^m{}_{(i,j)} + D_k^m{}_{(i,j-1)}) \tag{3.214}$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2\Delta z^2 \rho_{g(i,j)}^n} (D_k^m{}_{(i,j+1)} + D_k^m{}_{(i,j)}) - \frac{u_{z(i,j)}^n}{\Delta z} \tag{3.215}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} & = \frac{2\rho_{g(i,j)}^n}{\Delta t} Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i+1)}D_k^m{}_{(i+1,j)} + r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \\
& \quad - \frac{1}{2r_{(i)}\rho_{g(i,j)}^n} \left(\frac{r_{(i)}D_k^m{}_{(i,j)} + r_{(i-1)}D_k^m{}_{(i-1,j)}}{\Delta r} \right) \cdot \frac{Y_{k(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta r} - u_{r(i,j)}^n \cdot \frac{Y_{k(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - Y_{k(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta r}
\end{aligned} \tag{3.216}$$

Entonces:

$$Y_{k(i,j)}^{n+1} \mathbf{C} - Y_{k(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{A} - Y_{k(i,j+1)}^{n+1} \mathbf{B} = \mathbf{F} \quad / \cdot (-1) \tag{3.217}$$

$$Y_{k(i,j-1)}^{n+1} \mathbf{A} - Y_{k(i,j)}^{n+1} \mathbf{C} + Y_{k(i,j+1)}^{n+1} \mathbf{B} = -\mathbf{F} \tag{3.218}$$

Se sigue el algoritmo de Thomas, llegando finalmente a:

$$Y_{k(i,j)}^{n+1} = \alpha_{(i,j+1)} Y_{k(i,j+1)}^{n+1} + \beta_{(i,j+1)} \quad (3.219)$$

Con:

$$\alpha_{(i,j+1)} = \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\alpha_{(i,j)}} \quad (3.220)$$

$$\beta_{(i,j+1)} = \frac{\mathbf{F} + \mathbf{A}\beta_{(i,j)}}{\mathbf{C} - \mathbf{A}\alpha_{(i,j)}} \quad (3.221)$$

3.2.2.14 Condiciones de borde

Sabiendo que la condición de borde a la entrada es:

$$Y_{k(i,1)}^{n+1} = Y_0 \quad (3.222)$$

Se tiene que:

$$Y_{k(i,1)}^{n+1} = \alpha_{(i,2)} Y_{k(i,2)}^{n+1} + \beta_{(i,2)} \quad (3.223)$$

$$\alpha_{(i,2)} = 0 \quad (3.224)$$

$$\beta_{(i,2)} = Y_0 \quad (3.225)$$

A partir de esta condición se pueden calcular todos los α y β de los nodos interiores en el caso cilíndrico. En adición a esta condición, en el caso divergente, se necesita conocer la condición de los nodos adyacentes a la pared:

$$Y_{k(\text{contador},j)}^{n+1} = \alpha_{(\text{contador},j+1)} Y_{k(\text{contador},j+1)}^{n+1} + \beta_{(\text{contador},j+1)} \quad (3.226)$$

Considerando la condición de borde:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial n} = 0 \quad (3.227)$$

$$Y_{k(\text{contador},j)}^{n+1} = Y_{k(\text{contador}-1,j+1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.228)$$

Se obtiene:

$$\alpha_{(\text{contador},j+1)} = 0 \quad (3.229)$$

$$\beta_{(\text{contador},j+1)} = Y_{k(\text{contador}-1,j+1)}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.230)$$

Aplicando la condición de borde en la salida (i, k) :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial z} = 0 \quad (3.231)$$

Entonces:

$$Y_{k(i,k)}^{n+1} = Y_{k(i,k-1)}^{n+1} \quad (3.232)$$

$$Y_{k(i,k-1)}^{n+1} = \alpha_{(i,k)} Y_{k(i,k)}^{n+1} + \beta_{(i,k)} \quad (3.233)$$

Reemplazando:

$$Y_{k(i,k)}^{n+1} = \alpha_{(i,k)} Y_{k(i,k)}^{n+1} + \beta_{(i,k)} \quad (3.234)$$

Por lo que:

$$Y_{k(i,k)}^{n+1} = \frac{\beta_{(i,k)}}{1 - \alpha_{(i,k)}} \quad (3.235)$$

A partir de esta condición en el borde se puede hacer cálculo de la temperatura de todos los nodos interiores, para luego imponer las condiciones de borde correspondientes.

Condición sobre el eje (simetría):

$$\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0 \quad (3.236)$$

$$Y_{k(1,j)}^{n+1} = Y_{k(2,j)}^{n+1} \quad (3.237)$$

Condición de borde en la pared:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0 \quad (3.238)$$

$$Y_{k(m,j)}^{n+1} = Y_{k(m-1,j)}^{n+1} \quad (3.239)$$

La condición de borde en la pared para el caso divergente ya fue impuesta en los α y β .

3.3 Metodología Experimental

Para la fase experimental de la investigación, se llevan a cabo ensayos para tres reactores de medio poroso, entre los cuales se tiene uno de forma cilíndrica y dos divergentes. Cada uno de los reactores tienen como estructura acero al carbono, la cual es revestida interior y exteriormente por papel cerámico, aproximadamente de 1 centímetro de espesor, el cual actúa como un aislante con tal de tener mínimas pérdidas de calor a través de las paredes. El medio poroso inerte utilizado corresponde a esferas macizas de alúmina (Al_2O_3) de un diámetro promedio de 6 milímetros, lo cual resulta en una porosidad del 44% aproximadamente. En las **Figura 3.6, 3.7** y **3.8** se puede ver una representación de los arreglos experimentales.

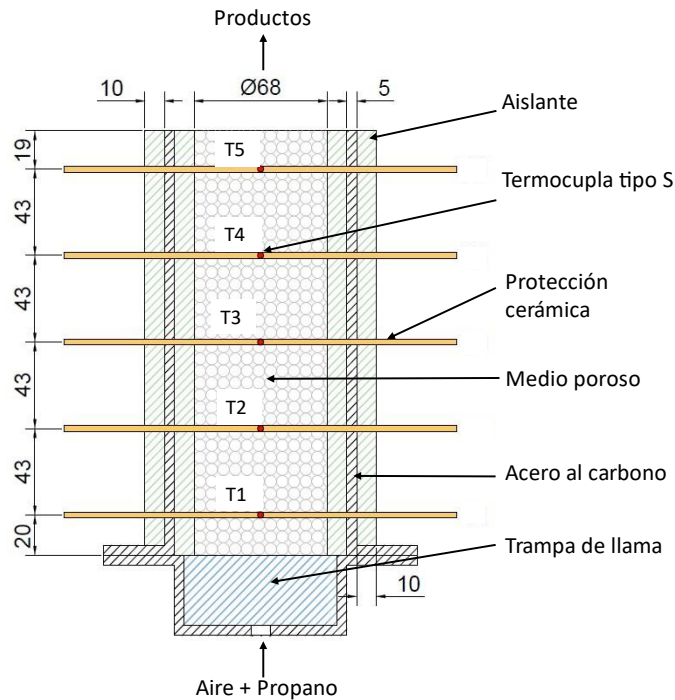


Figura 3.6: Esquema del reactor de medio poroso cilíndrico empleado.

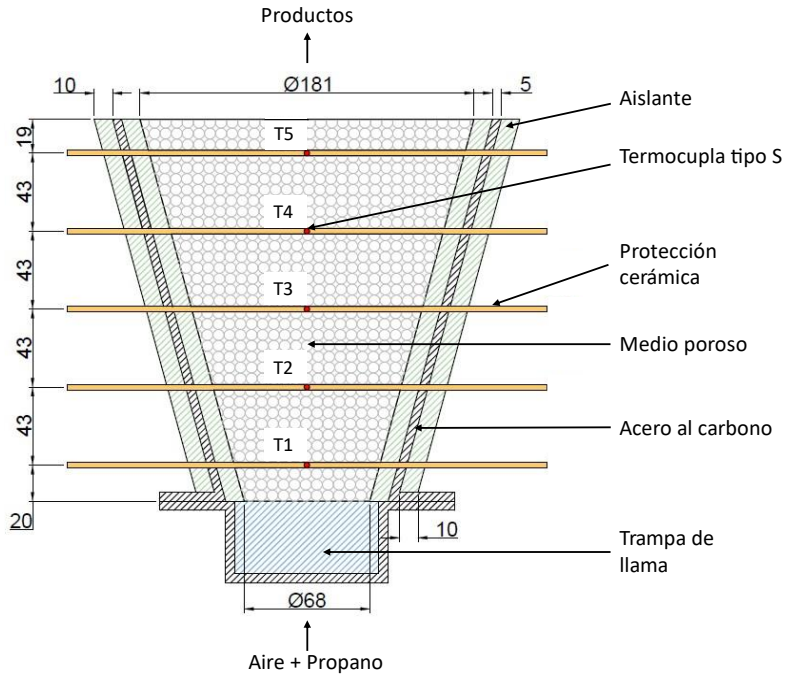


Figura 3.7: Esquema representativo del reactor de medio poroso divergente de 15° de divergencia.

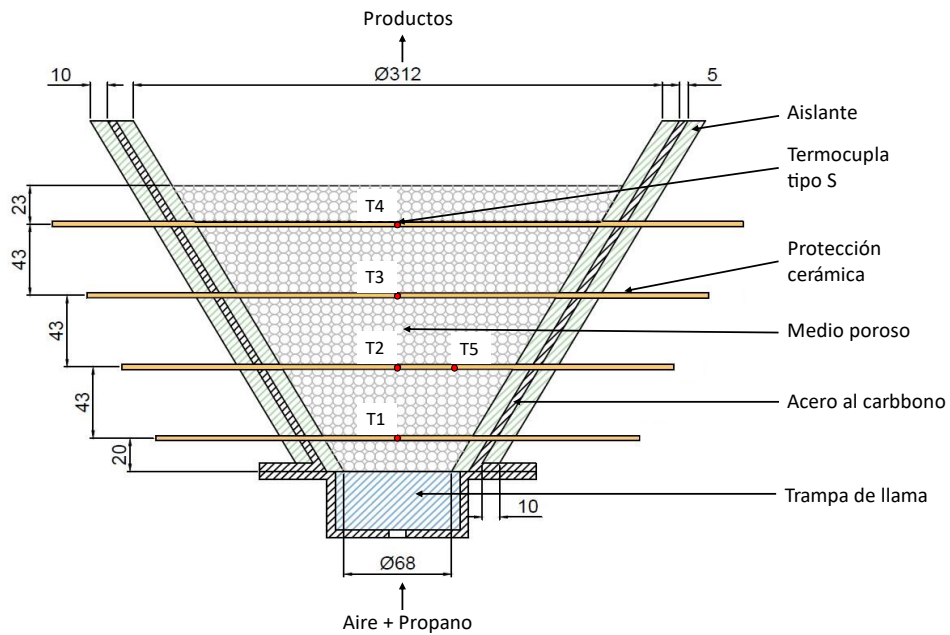


Figura 3.8: Esquema representativo del reactor de medio poroso divergente de 30° de divergencia.

Para la medición de temperaturas, se hace uso de termocuplas tipo S de Platino-Rodio, dispuestas en varillas protectoras de cerámica horizontalmente a través del reactor, con el bulbo de medición en el eje central y equiespaciadas. Los datos se recolectan en tiempo real a través de un adquisidor de datos OMB-DAQ5455 con una frecuencia de 1 Hz. Físicamente se tienen dos temperaturas

dentro del reactor, una del medio sólido y otra del medio gaseoso. La recolección de temperatura de las termocuplas corresponde a la del sólido y éstas van desde T5 a T1 en el caso cilíndrico y de 15°, en el caso de 30°, se procede a utilizar la T5 para medir la variación radial de temperatura en contraste con la T2, a una distancia media entre esta última y la pared del reactor.

Debido a que el combustible corresponde a mezclas Propano-Aire, se utiliza un arreglo neumático que consiste en un compresor de aire, filtro de aceites y un filtro de humedad. El Propano es alimentado directamente de la línea conectada a un estanque de la empresa Lipigas. Los caudales de ambos fluidos son controlados por controladores de flujo especializados. El proceder antes de cada encendido de un reactor corresponde a: purga del compresor y filtros, pruebas de hermeticidad en ambas líneas de alimentación, encendido de la unidad recolectora de datos, ajuste de controladores de flujo, encendido.

Los reactores son abiertos a la atmósfera y alimentados desde el extremo inferior ($z = 0$), a través de la trampa de llama la cual cuenta con orificios. La ignición de la mezcla se realiza en el extremo superior del reactor con un encendedor. La relación inicial de combustible y aire corresponde a $\phi = 1$, y asegura una inmersión del frente de llama dentro del medio poroso. Luego de alcanzar la zona de ingreso de premezcla o T1, se modifican los caudales de combustible y aire para alcanzar la relación de equivalencia y velocidad inicial de filtración deseada. Ya que los reactores cilíndricos se caracterizan por solo tener 1 punto de estancamiento del frente de combustión, en la mayoría de los casos se tendrá un viaje aguas arriba o aguas abajo. Caso distinto son los reactores divergentes que debido a que poseen velocidades de flujo distintas a lo largo del reactor pueden poseer más de un punto de estancamiento dependiendo de la mezcla de combustible aire.



Figura 3.9: Reactores de medio poroso cilíndrico (izquierda) y con ángulo de divergencia de 15° (centro) y 30° (derecha).

Capítulo 4:

4 Resultados y discusión

En el presente capítulo se exponen los resultados tanto experimentales como numéricos. Los resultados obtenidos desde los ensayos hechos en laboratorio corresponden a las recolecciones de las temperaturas por parte de las termocupas dispuestas en los reactores a través del tiempo. Claramente, debido a la cantidad limitada de termocupas, la resolución respecto de la ubicación real y temperatura instantánea se reduce a los picos de las curvas generadas, a partir de lo cual se construyen las gráficas de posición del frente de combustión vs tiempo adyacentes a los perfiles. Se vuelve a recalcar que la temperatura registrada por las termocupas corresponde a la del sólido, por lo cual estos resultados se comparan con las temperaturas del sólido predichas por las simulaciones. Gracias a la construcción de un modelo matemático en 2D, se aprovecha con énfasis de exponer figuras mostrando distribuciones de campos y líneas de contorno de la variable en cuestión.

Primeramente, se muestran los resultados y discusión respecto al reactor cilíndrico, para luego abarcar ambos reactores divergentes y posteriormente analizar el comportamiento de los gases producto. Adicionalmente se agregan comentarios al final del capítulo.

4.1 Reactor cilíndrico

A continuación, se presentan los resultados experimentales para el reactor cilíndrico.

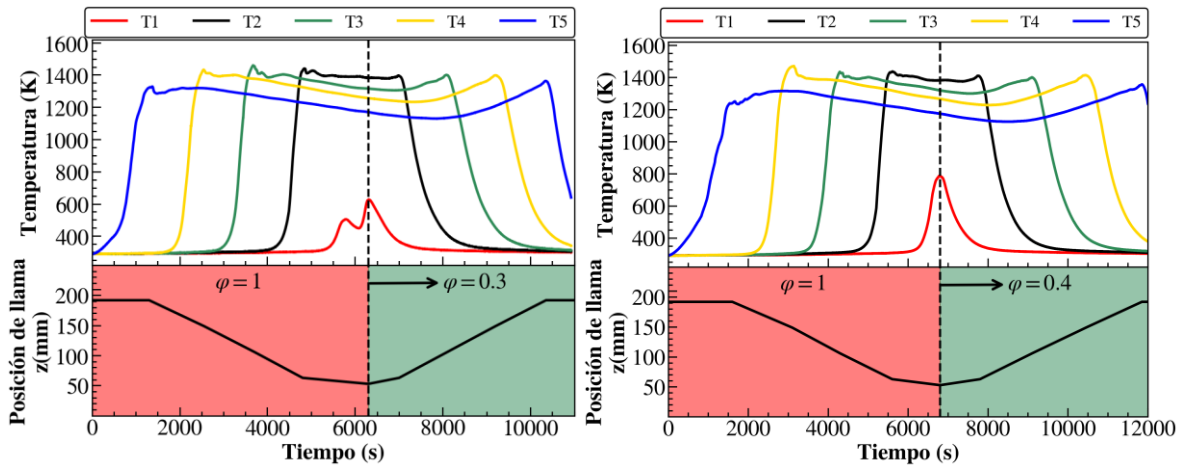


Figura 4.1: Perfil térmico de termocupas para ensayo de relación de equivalencia 0.3 y 0.4, reactor de 0° , velocidad de filtración 0.35 m/s.

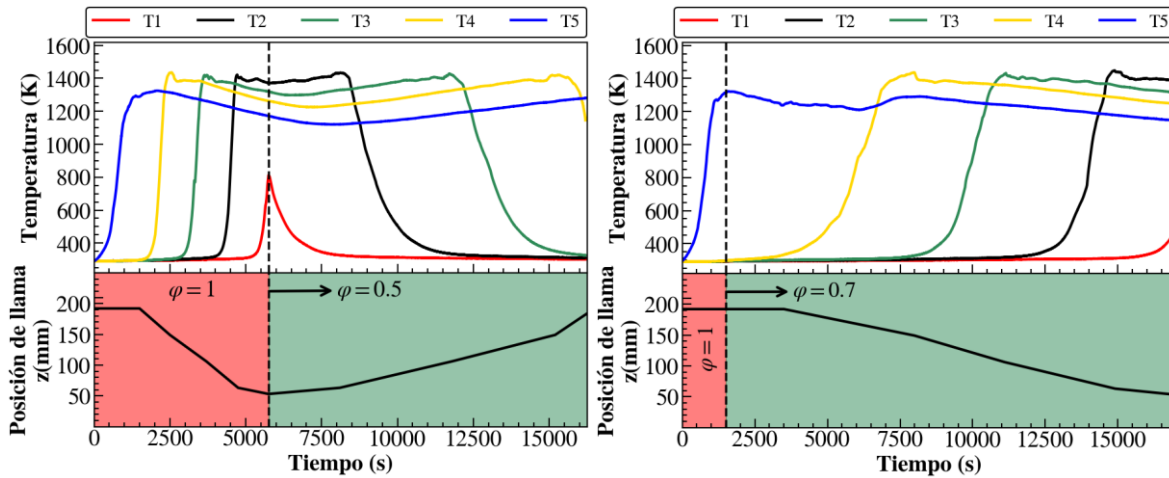


Figura 4.2: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.5 y 0.7, reactor 0°, velocidad de filtración 0.35 m/s.

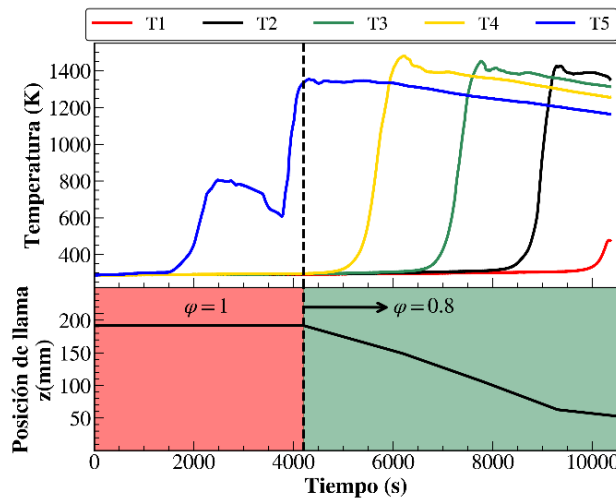


Figura 4.3: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.8, reactor 0°, velocidad de filtración 0.35 m/s.

Primeramente, se lleva a cabo la comprobación de la independencia de malla, en donde 4 mallas irregulares fueron elegidas con gran diferencia en la cantidad de nodos. Esto se realiza para verificar que los resultados alcanzados no sean dependientes de la cantidad de nodos del dominio. Se puede notar en la **Figura 4.4** que la independencia de malla se alcanza alrededor de los 15000 nodos, en donde la diferencia de temperatura de gas es despreciable, al igual que para la temperatura del sólido. Estas simulaciones fueron realizadas para una relación de equivalencia de 0.7 y 0.35 m/s de velocidad de filtración a la entrada. Más a fondo, se nota que para una malla de 301x101 y 151x75 prácticamente no hay diferencia y los perfiles se sobreponen indicando que también su velocidad es igual. Sin embargo, la malla escogida será la de 301x101, es decir 30401 nodos, por la suavidad y resolución que implica para los resultados.

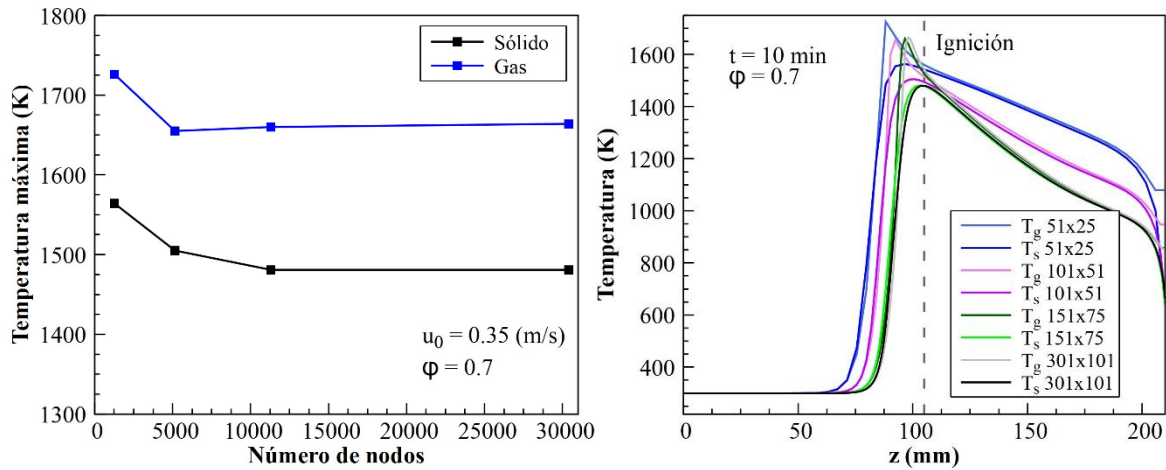


Figura 4.4: Resultados verificación de independencia de malla.

En la **Figura 4.5 a)** se presenta la predicción numérica del perfil del frente de combustión para una relación de equivalencia de 0.7 con velocidad a la entrada de 0.35 m/s y la medición experimental por parte de las termocuplas. Estos resultados están en un rango aceptable, mostrando desviaciones en las temperaturas posterior a la zona de reacción, que se atribuye a las condiciones de pérdida de calor de pared y salida que pudieron ser impuestas de manera muy fuerte en el dominio, haciendo que las predicciones a la salida sean menores. De todas maneras, el modelo numérico es aceptable. La evolución de la fracción molar de las especies mostrada en **Figura 4.5 b)** evidencia resultados acordes con la reacción global de la oxidación de propano, con el consumo total de este y el exceso de oxígeno a la salida, así como la producción de CO_2 y H_2O .

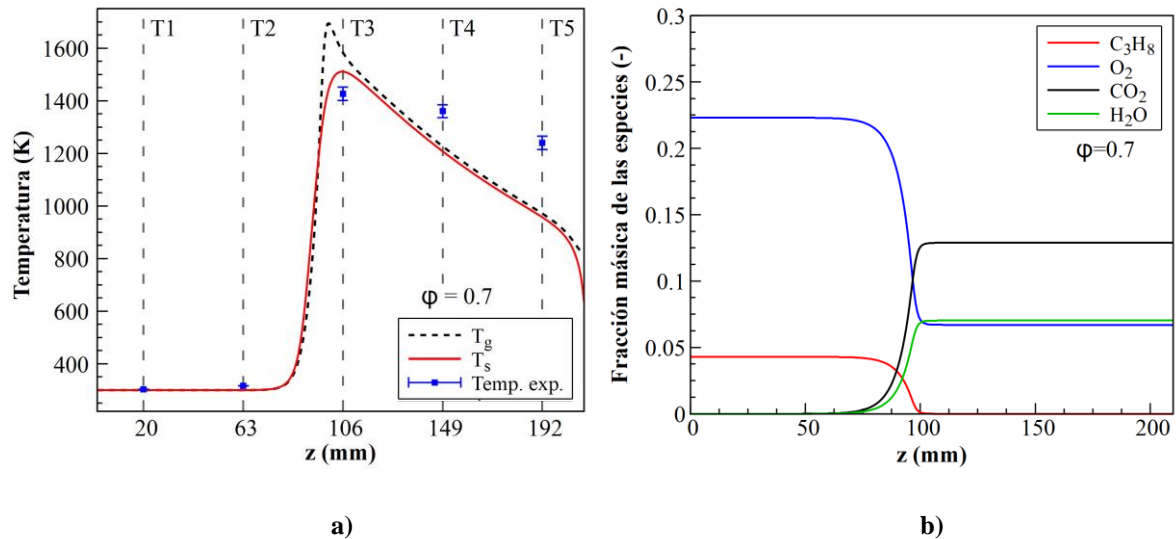


Figura 4.5: Con $u_0 = 0.35$ m/s y $\phi = 0.7$ en reactor cilíndrico, **a)** Comparación numérica y experimental de la temperatura sobre el eje axial. **b)** Fracción molar de las especies a lo largo del eje axial.

La **Figura 4.6 a)**, muestra la velocidad del frente de combustión en función de la relación de equivalencia. La mayor magnitud de esta velocidad corresponde experimentalmente a $\phi = 0.3$ con $3.7 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ en dirección aguas abajo y para 1 con $3.5 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ en dirección aguas arriba. Comparando la pendiente de la curva experimental generada entre los puntos, se nota que la tendencia para el extremo estequiométrico es la desaceleración, debido a la posterior transición a mezcla rica. Las predicciones para la velocidad del frente de combustión están en el mismo orden de magnitud y muestra gran similitud para el rango entre 0.4 y 0.8. Entre 0.8 y 1 se nota una mayor diferencia, con las velocidades numéricas teniendo una mayor magnitud aguas arriba. La ubicación del punto de operación estacionario aparece alrededor de 0.6, con la velocidad predicha de ese frente de combustión siendo $2.5 \cdot 10^{-4} \text{ cm/s}$. En general, se puede ver que el modelo construido se acerca bastante a lo experimental, con las mayores desviaciones siendo los extremos del rango de mezcla pobre. En la **Figura 4.6 b)** se muestra una comparación entre los resultados para las relaciones de equivalencia entre 0.3 y 1 con la velocidad de 0.35 m/s que se llevaron a cabo los ensayos para el reactor cilíndrico. Las temperaturas máximas predichas presentan baja desviación en promedio, con la llama de 0.7 presentando 60 K de diferencia, lo que significa un 4.1% de error. En el régimen aguas abajo se nota que las temperaturas predichas son subestimadas, mientras que aguas arriba, es decir 0.6 en adelante, son sobre estimadas, pero existe bastante cercanía entre los resultados de las llamas de los extremos. Si bien la temperatura de las llamas más pobres es levemente menor a las cercanas a la estequiometría, esto se explica debido a que, una vez precalentado el medio, estas llamas se desplazan a través de un medio poroso que aporta energía de forma activa a la reacción, causando que se tenga combustión con exceso de entalpía. Esto es apreciable con las llamas experimentales y numéricas de $\phi = 0.3$ y 0.4, las cuales superan a la temperatura de llama adiabática. La temperatura de la llama estequiométrica presenta una baja respecto a las anteriores debido a que se empieza a tener una transición a mezcla rica, efecto que se replica numéricamente.

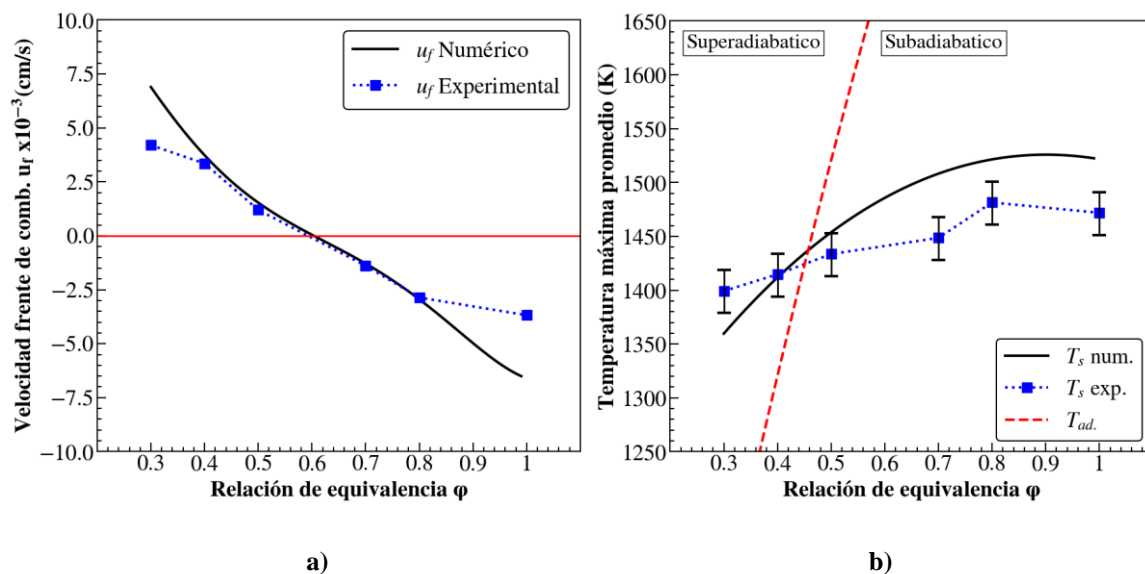


Figura 4.6: Para reactor cilíndrico y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$: **a)** Velocidad del frente de combustión predicha y experimental, **b)** Temperatura de llama adiabática, temperatura máxima promedio predicha y experimental.

En comparación con un modelo unidimensional, cuando se observa la **Figura 4.7** es claro que uno bidimensional es necesario para representar el comportamiento de los campos de temperatura. La distribución de la temperatura del sólido y sus líneas de contorno exhiben un peak de temperatura sobre el eje central con decrecimiento hacia las paredes debido a las pérdidas de calor por conducción y convección.

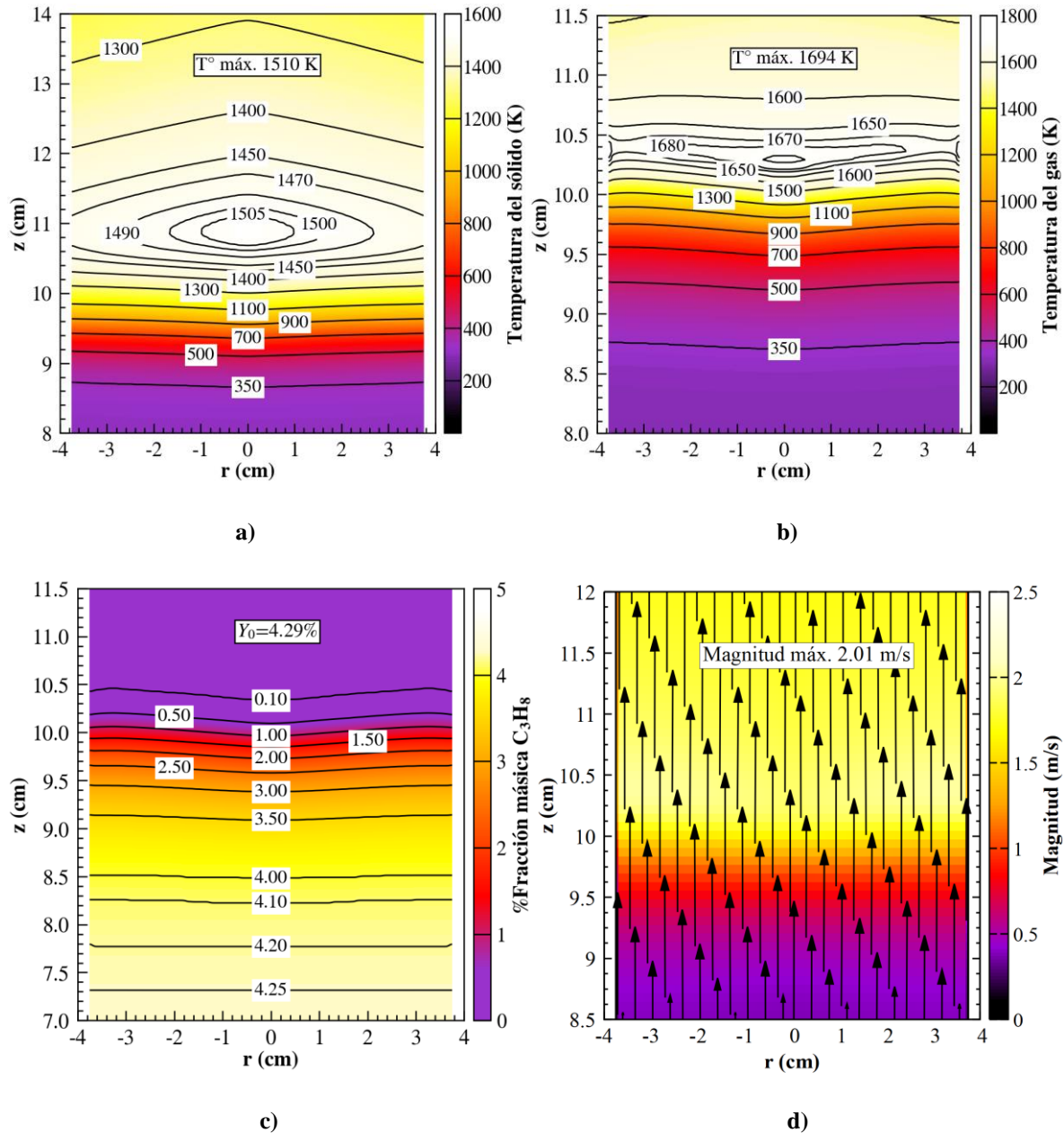


Figura 4.7: Llama de 0.7, 30 minutos luego de ignición en $z = 12.5$ cm, $u_0 = 0.35$ m/s en reactor cilíndrico, campos de **a)** Temperatura del sólido, **b)** temperatura del gas, **c)** Fracción másica de propano, **d)** campo vectorial de velocidades.

Un gran gradiente de temperatura ocurre previo a la zona del peak, lo cual coincide con el espesor de la zona de reacción mostrada en la **Figura 4.7 c)**, que empieza alrededor de los 8 cm y termina a los 10.5 cm. El peak de temperatura del gas se ubica previo al del sólido teniendo un gradiente aún más pronunciado, mostrando líneas de contorno más contraídas, manteniendo la mayor temperatura en el centro y decreciendo a las paredes. Además, se puede ver que el sólido precalienta al gas al tener temperaturas mayores en la zona roja y morada previa a la zona de reacción, entre los 9 cm y 10 cm. Por su parte, el campo vectorial de velocidad (**Figura 4.7 d)**) muestra una magnitud cero en las paredes gracias a la condición de no deslizamiento y mayor valor hacia el centro, especialmente donde el gas adquiere su mayor temperatura, llegando la magnitud máxima de ésta a ser casi 6 veces la de ingreso. La fracción másica de combustible muestra líneas de contorno arqueadas a través de la dimensión radial del reactor y se consume rápidamente una vez en la zona de alta temperatura, con el valor mínimo siendo presente con el peak de temperatura del gas (~10.5 cm). Estos resultados son consistentes con los predichos por [37,50,51]. Debido a que las zonas de máxima temperatura se concentraron en un espacio muy reducido, no es posible rescatar líneas de contorno de aquellas.

La influencia de la relación de equivalencia sobre el campo de temperatura del medio sólido se aprecia bidimensionalmente en la **Figura 4.8**. A partir de las líneas de contorno de temperatura y considerando que para la velocidad de ingreso de la mezcla seleccionada el punto de inflexión de régimen aguas abajo y arriba se ubica alrededor de $\varphi = 0.6$, se puede inferir que las mezclas aguas arriba exhiben un campo contraído hacia la dirección de avance y con un gradiente bastante pronunciado, con las líneas cada vez más juntas a medida que aumenta la relación de equivalencia. Esto es consecuencia del aumento de la velocidad del frente y una combustión con una reacción más potente. Aguas abajo, se nota una mayor progresividad hacia el peak de temperatura ya que el frente se desplaza sobre un medio calentado por la misma reacción.

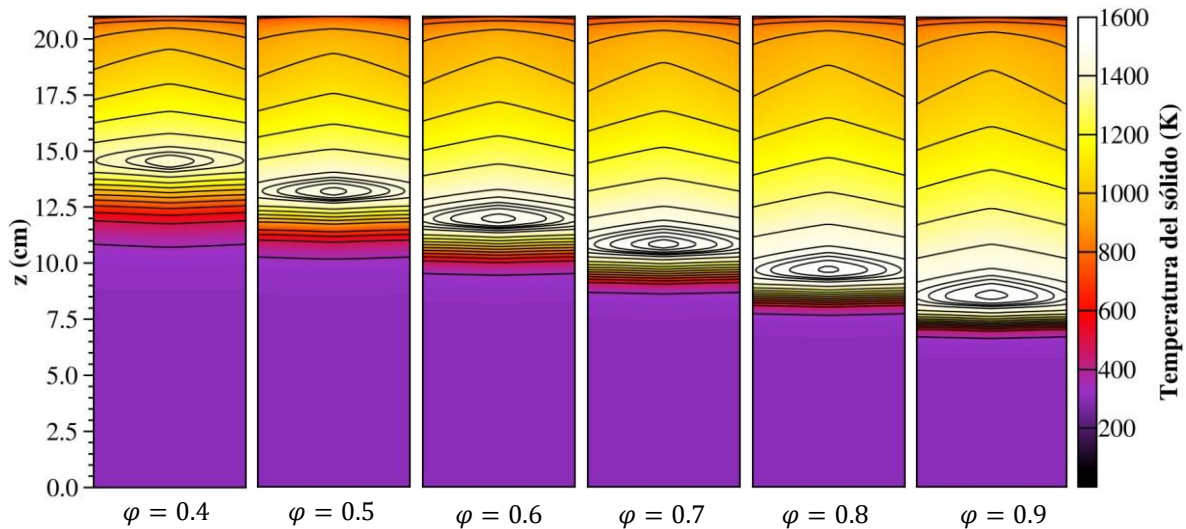


Figura 4.8: Efecto de la relación de equivalencia en campos de temperatura de la fase sólida luego de 10 minutos de ignición al centro del reactor.

Los perfiles de temperatura de 0.4 y 0.8 se muestran en la **Figura 4.9 a)** después de 600 segundos (10 minutos) luego de la ignición generada en la mitad del reactor. Los desplazamientos aguas arriba y aguas debajo de los perfiles son evidenciados, así como las diferencias entre las temperaturas de la fase gaseosa y sólida. Claramente la diferencia entre estas temperaturas máximas no es la misma entre las llamas, siendo para la de 0.8 de 211 K y para 0.4 de 106 K. Estos resultados están a la par con lo concluido por Zheng et al. [52] y son explicados por el desplazamiento de la llama hacia un medio poroso helado (aguas arriba) y uno precalentado (aguas abajo), así como una mayor cantidad de energía liberada por una reacción más rica en combustible.

La evolución temporal del perfil del frente de combustión es visto en **Figura 4.9 b)**, evidenciando el desplazamiento y la ubicación de la temperatura máxima de la fase sólida. Se puede notar que entre 0 y 10 minutos ocurre del desarrollo del perfil, ya que el desplazamiento desde la ubicación de la ignición hasta la posición de los 10 minutos es menor al desplazamiento posterior a ésta, que, además, es constante. Esto último es evidencia de que la velocidad del frente de combustión tiene igual magnitud y es inalterada a lo largo del reactor.

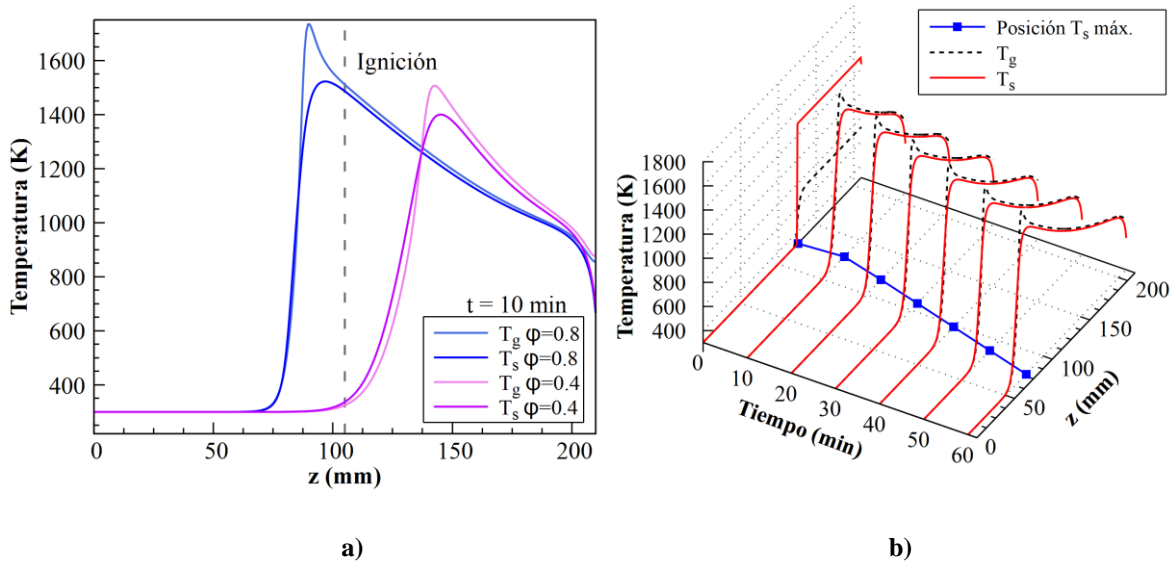


Figura 4.9: a) Frente de combustión para llamas de $\varphi = 0.4$ y 0.8 , 10 minutos después de la ignición, b) Evolución temporal del frente de combustión y ubicación de la temperatura máxima del sólido para llama de $\varphi = 0.7$.

Viendo la influencia de la velocidad de filtración a la entrada del reactor, se comparan cinco velocidades, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 m/s. Se utiliza la relación de equivalencia de 0.5 y 0.7 a 15 minutos después de iniciar la combustión al centro del reactor (**Figura 4.10**). Claramente, la velocidad del frente aumenta aguas abajo a medida que se incrementa la velocidad de flujo axial de mezcla. Para la llama de 0.5 el incremento es suave, desde $1.4 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ hasta $1.9 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ para una velocidad de entrada de 0.6 m/s, posterior a esto se aprecia un incremento lineal hasta $7.3 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ para la llama más rápida. Para la llama de 0.7, existe un comportamiento de aceleración aguas arriba al aumentar levemente desde 0.2 m/s, lo cual luego se invierte en 0.6 m/s para luego incrementar linealmente hasta $2.1 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$. Este fenómeno es causado debido a la mayor

potencia que adquiere la llama, la cual es capaz de precalentar el medio aguas arriba y así desplazarse en aquella dirección. Sin embargo, luego de cierta velocidad entre 0.4 y 0.6 m/s, el caudal de flujo entrante es tal que la mezcla fría evita este efecto y obliga al frente a desplazarse aguas abajo, lo cual también viene acompañado de que la velocidad de quemado es superada por la de filtración. Las temperaturas aumentan considerablemente gracias al mayor ingreso de combustible y, por ende, un incremento de la potencia. Esto no solo en la zona de la reacción, si no que la temperatura posterior al peak se mantiene y transfiere aguas abajo de mejor manera en los frentes más rápidos gracias a la mayor tasa de transferencia por convección, mientras que para la mezcla de 0.2 m/s, la temperatura decrece drásticamente hacia la salida. Los resultados son consistentes con lo planteado en la literatura [53,54].

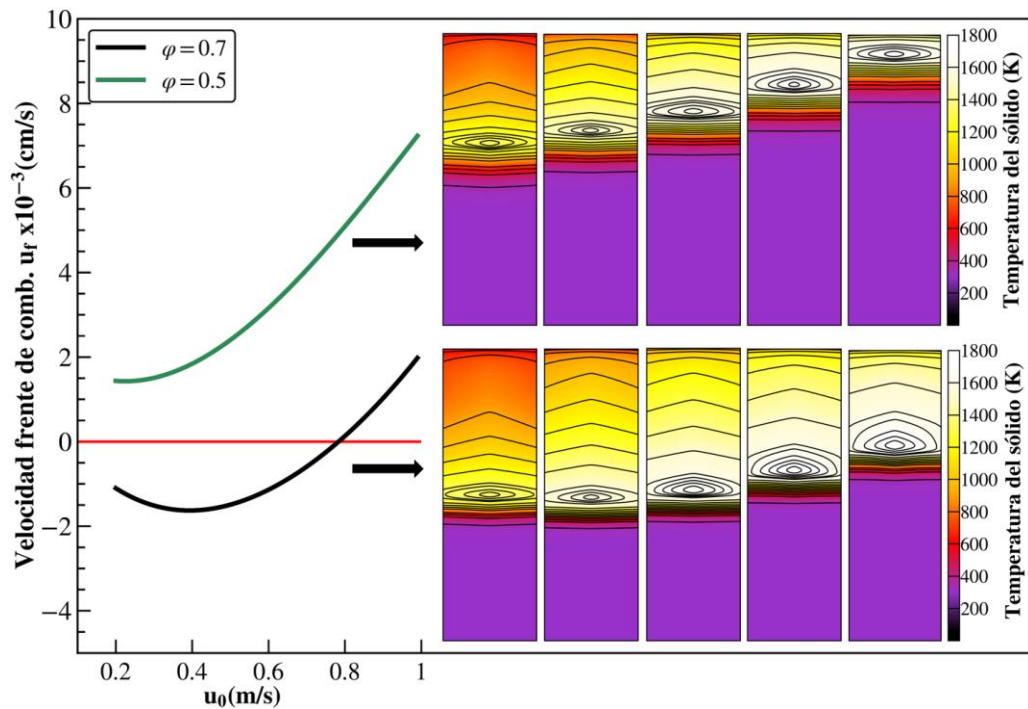


Figura 4.10: Efecto de la velocidad de entrada en campos de temperatura y velocidad del frente de combustión luego de 15 minutos de la ignición al centro del reactor.

4.2 Reactores divergentes

A continuación, se muestran los resultados obtenidos para los reactores divergentes de 15° y 30°, respectivamente.

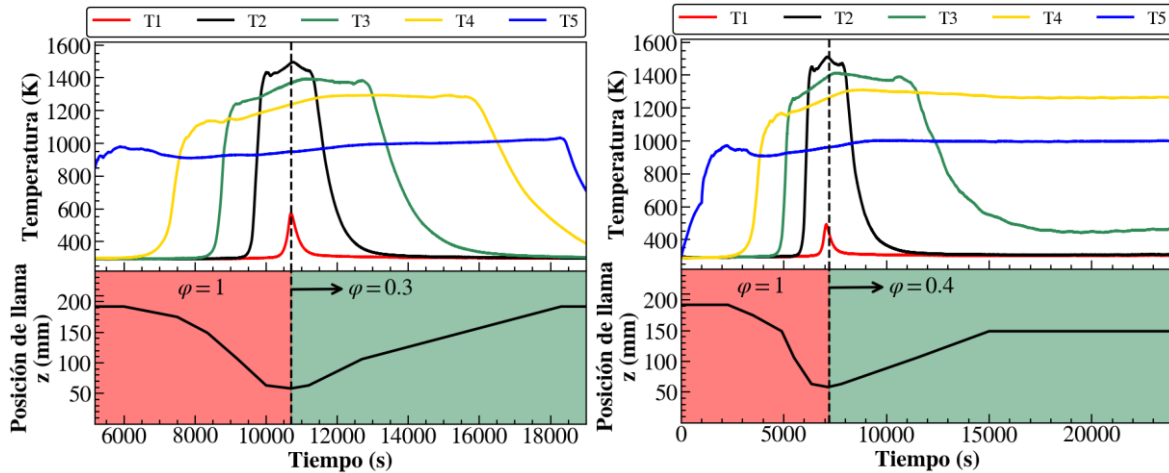


Figura 4.11: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.3 y 0.4, reactor 15°, velocidad de filtración 0.63 m/s.

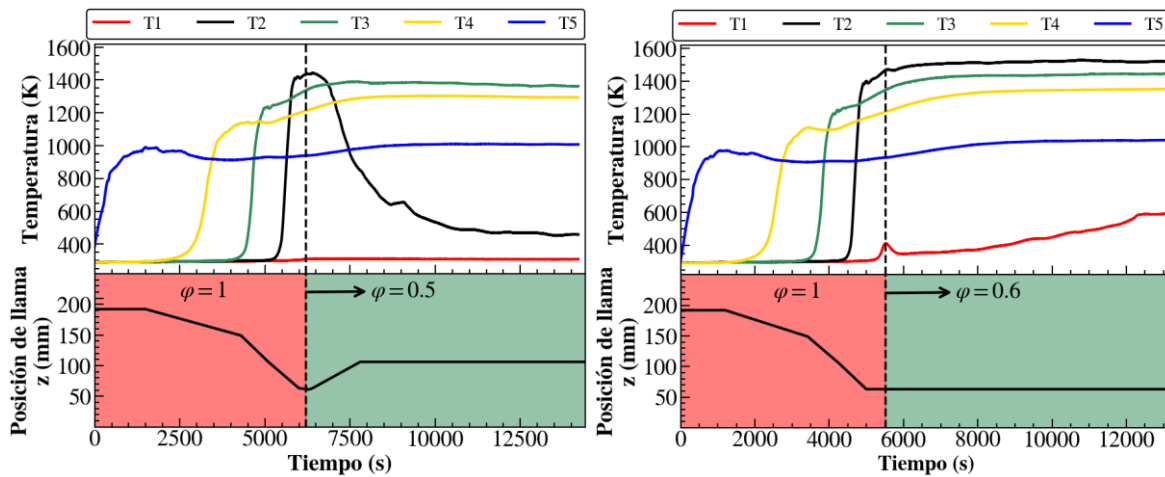


Figura 4.12: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.5 y 0.6, reactor 15°, velocidad de filtración 0.63 m/s.

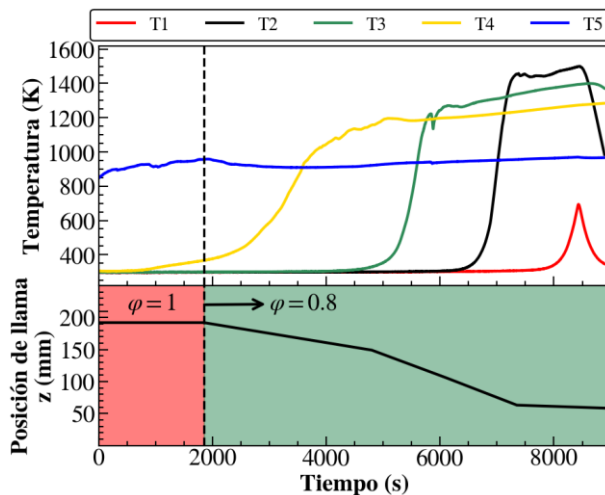


Figura 4.13: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.8, reactor 15°, velocidad de filtración 0.63 m/s.

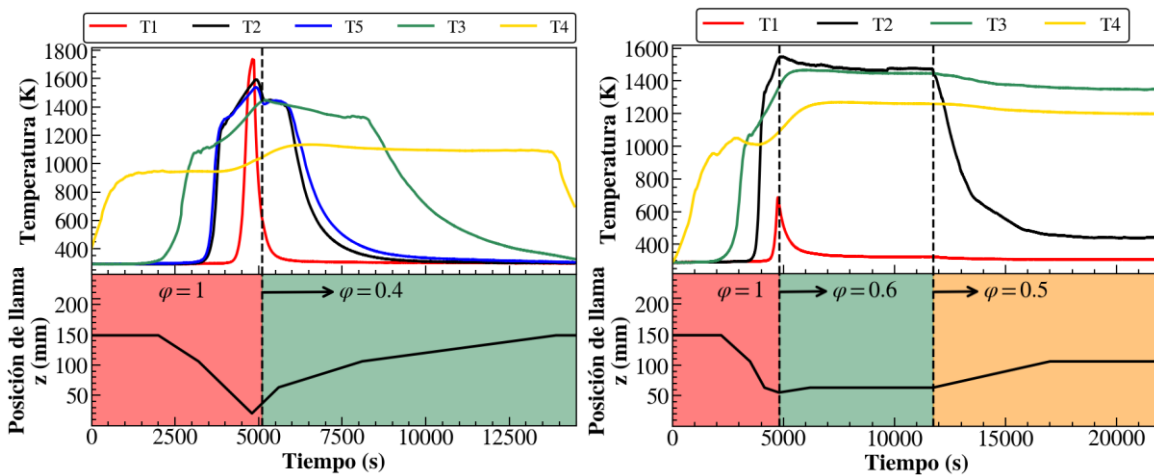


Figura 4.14: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.4, 0.5 y 0.6, reactor 30°, velocidad de filtración 0.90 m/s.

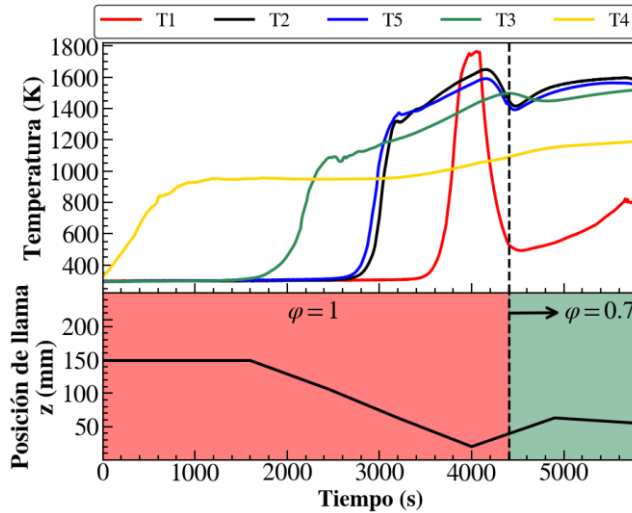


Figura 4.15: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 0.7, reactor 30°, velocidad de filtración 0.90 m/s.

Lo primero es comparar la forma de los perfiles recolectados por las termocuplas entre reactores, apreciable en la **Figura 4.16**. Para el reactor de 0°, aguas arriba se nota un alto gradiente cuando se aproxima el frente de combustión hasta un peak de temperatura que se replica para cada termocupla, posterior a lo cual se nota un enfriamiento progresivo conforme el frente el frente sigue avanzando a través del reactor. Aguas abajo, se nota un calentamiento progresivo hasta un nuevo máximo de temperatura para después enfriarse abruptamente. Este enfriamiento rápido se debe a la temperatura de entrada de la premezcla. En los reactores divergentes si bien existe un alto gradiente de temperatura una vez se acerca el frente a la termocupla, no se logra apreciar un peak marcado, más bien se aprecia una perturbación en forma de oscilación y un crecimiento con pendiente menor posterior a ese evento. Lo anterior es generado debido a que temperatura máxima de la llama aumenta conforme esta avanza a diámetros menores ya que existe menor medio sólido presente. Es entonces que el calor proveniente de esta reacción con mayor potencia calorífica por área transversal calienta el medio aguas abajo, incluso cuando ya sobrepasa las termocuplas siguientes. Caso contrario es cuando se tiene un desplazamiento aguas abajo, en donde la temperatura descende conforme se aproxima a diámetros menores sin peak, con el perfil asemejándose a escalones.

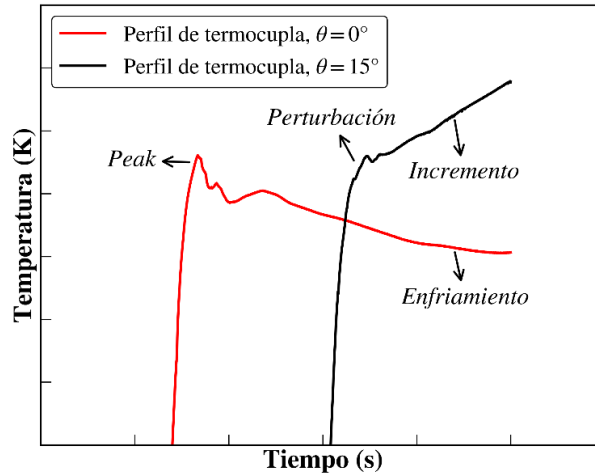


Figura 4.16: Visualización de perfiles de termocuplas para reactor de 0° y divergente (15°).

Se procede a comprobar la independencia de malla de los modelos divergentes. Es de destacar, tal como se mencionó al presentar el modelo, que la cantidad de nodos radiales queda determinada en función de los nodos axiales. Para el modelo de 15° se utilizaron cuatro mallas irregulares, sin embargo, después de cierta cantidad de nodos (120 nodos axiales aproximadamente) el sistema diverge, por lo cual se intenta ocupar la mayor cantidad de nodos posibles. Es así como se puede apreciar que para el modelo de 15° existen leves desviaciones entre los resultados de cada malla. Por otro lado, para el modelo de 30°, se nota que existe gran similitud entre los resultados de las tres mallas y, de hecho, los resultados entre la malla de 75x97 y 101x132 son prácticamente iguales salvo pequeñas diferencias en las temperaturas de ambas fases, como es visto en la **Figura 4.18**.

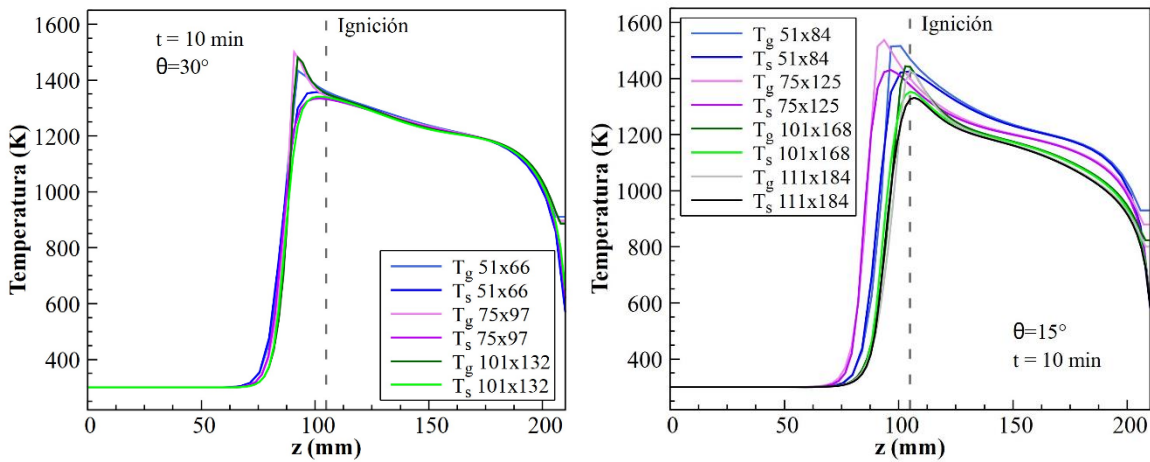


Figura 4.17: Comprobación de independencia de malla de modelos divergentes, 10 minutos luego de ignición en la mitad del reactor.

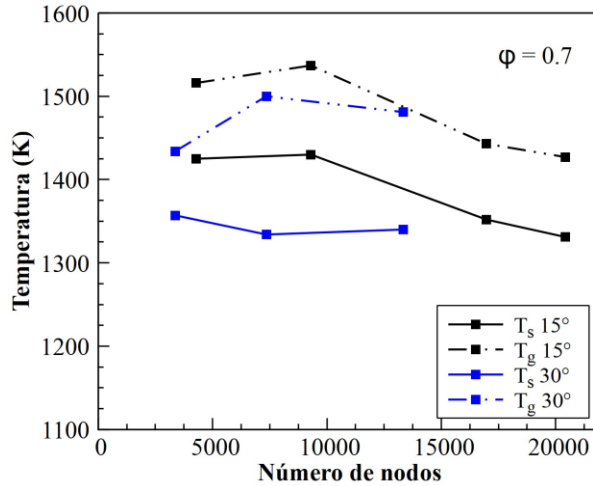


Figura 4.18: Temperatura de fases sólida y gaseosa en función de la cantidad de nodos, 10 minutos luego de ignición en la mitad del reactor.

Como se explicó anteriormente, lo primero que es apreciable en las series de figuras de los reactores divergentes, es que la temperatura con la configuración $\varphi = 1$ o 0.8 en desplazamiento aguas arriba aumenta constantemente cuando el frente se aproxima a radios menores, lo cual difiere grandemente del reactor cilíndrico, en donde la temperatura máxima prácticamente es constante. En la **Figura 4.19** se aprecia la predicción y resultados experimentales de temperaturas máximas con $\varphi = 1$ en el reactor de 30° . Para el caso experimental, el aumento es aparentemente lineal, en donde el incremento más significativo se da entre la termocupla T3 y T2 siendo de 383 K, lo cual es un 33% y considerando desde la T4 a la T1 existe un aumento total de 86%.

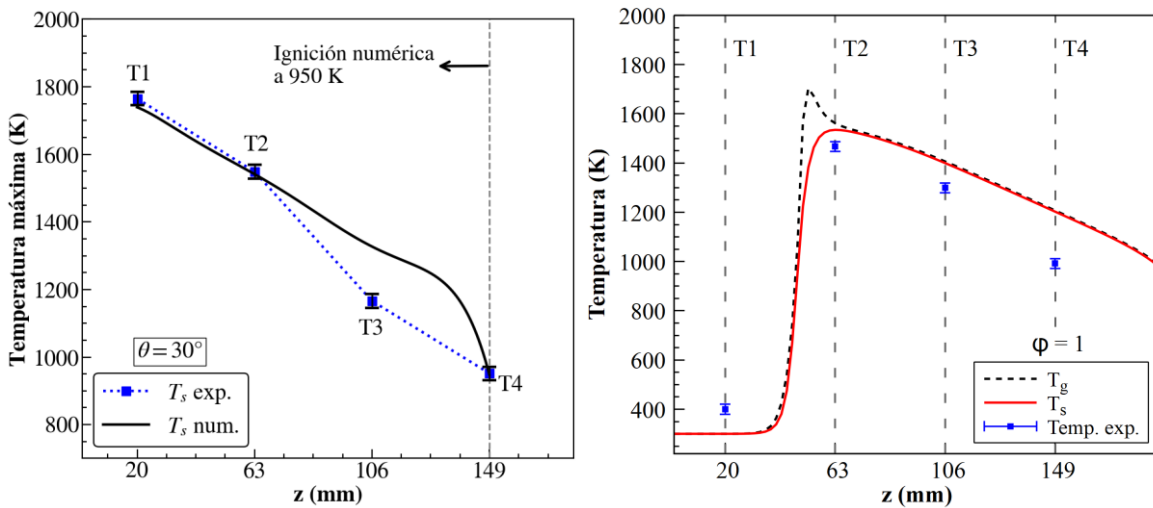


Figura 4.19: Temperatura máxima y desplazamiento del frente de combustión en reactor divergente de 30° , $\varphi = 1$.

Numéricamente, la tendencia de aumento de temperaturas también es lineal, en donde la mayor diferencia con la data experimental se da en T3, es decir a los 106 mm con alrededor de 154 K.

Existe una desviación luego de la ignición numérica, la cual es hecha a la misma temperatura máxima experimental registrada en T4, ya que después de esto el perfil numérico tiene una etapa de formación y posterior propagación. Viendo la forma del perfil en comparación con las temperaturas experimentales instantáneas en los 63 mm, es decir, superponiendo ambos perfiles, se puede ver que hay un buen acercamiento de la predicción de la temperatura máxima, así como la temperatura de la zona de postcombustión.

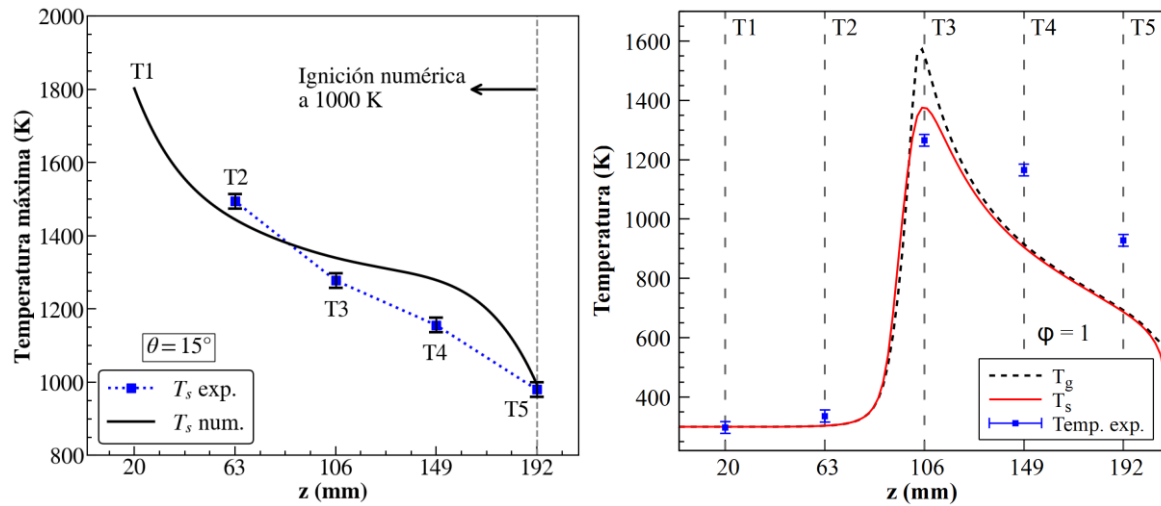


Figura 4.20: Temperatura máxima y desplazamiento del frente de combustión en reactor divergente de 15° , $\phi = 1$.

Siguiendo el mismo lineamiento anterior, se hace la simulación para el reactor de 15° con $\phi = 1$. Se encuentra que en este caso existen mayores desviaciones que para el reactor de 30° . Esto es apreciable en la diferencia de temperaturas máximas, que en su máximo punto difieren en 127 K para la posición de 149 mm , sin embargo, el incremento de temperatura desde la ignición hasta la posición 63 mm es bastante acertada. La temperatura experimental de la termocupla T1 no fue registrada por precauciones de seguridad. Numéricamente, desde la temperatura de ignición de 1000 K hasta lo registrado en la posición de la termocupla T1, es decir, $\sim 1800\text{ K}$, existe un aumento de 80% , muy semejante a lo hallado en el reactor de 30° . Superponiendo los perfiles experimental y numérico en la posición de 106 mm , se halla que la mayor diferencia se da en la zona de post combustión, específicamente con T4 y T5, lo cual puede deberse a las pérdidas de calor impuestas en el dominio numérico a la salida y el intercambio de calor al interior del reactor entre la fase gaseosa y la sólida, la cual es más potente en los diámetros mayores.

La visualización bidimensional de los campos de temperatura tanto sólido como gaseoso, además de los campos de consumo de propano y velocidad, se presenta en la **Figura 4.21** **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** y **Figura 4.22** para el reactor de 30° , y en la **Figura 4.23** y **Figura 4.24** para el de 15° .

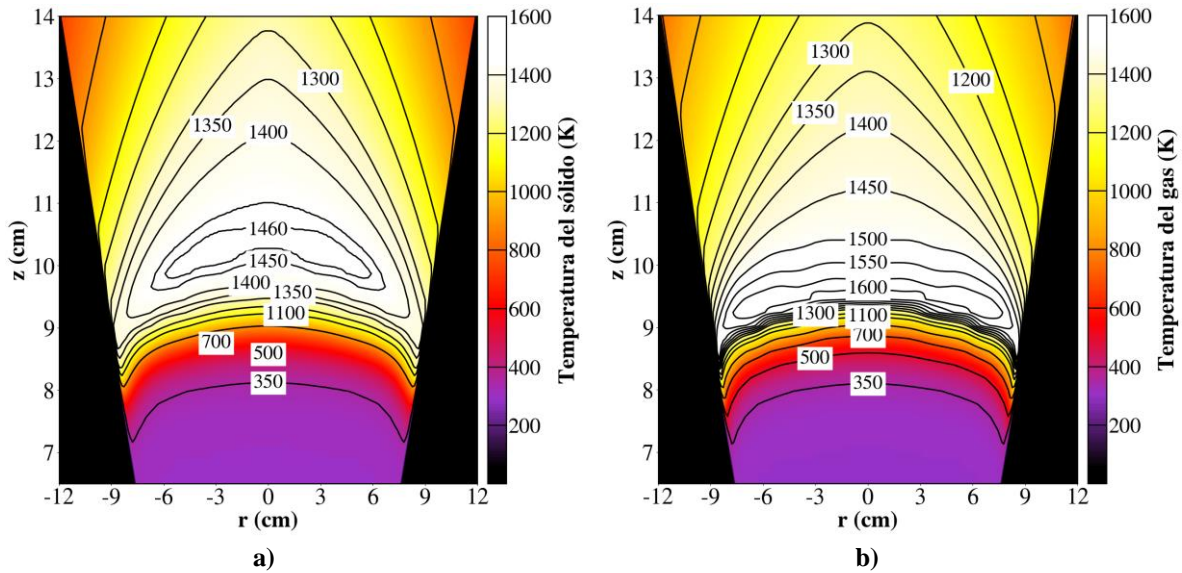


Figura 4.21: Para reactor de 30° y $\varphi = 0.9$ luego de 36 minutos de ignición, campos de a) Temperatura del sólido b) Temperatura del gas.

La mayor diferencia con el reactor cilíndrico es la forma de la llama, la cual es cóncava, sin embargo, el comportamiento de decaimiento de temperatura hacia las paredes permanece constante, con un aumento progresivo de la temperatura del sólido en contraste con un gradiente bastante pronunciado del gas. Esto anterior es respaldado por los resultados hallados por [10,11], en donde se aprecia una clara curvatura de las líneas de contorno y de los campos de temperatura dentro del reactor. Entre los reactores, se nota que la llama del de 30° tiene una geometría mucho más ancha radialmente alcanzando su zona de altas temperaturas con mayor cercanía a las paredes.

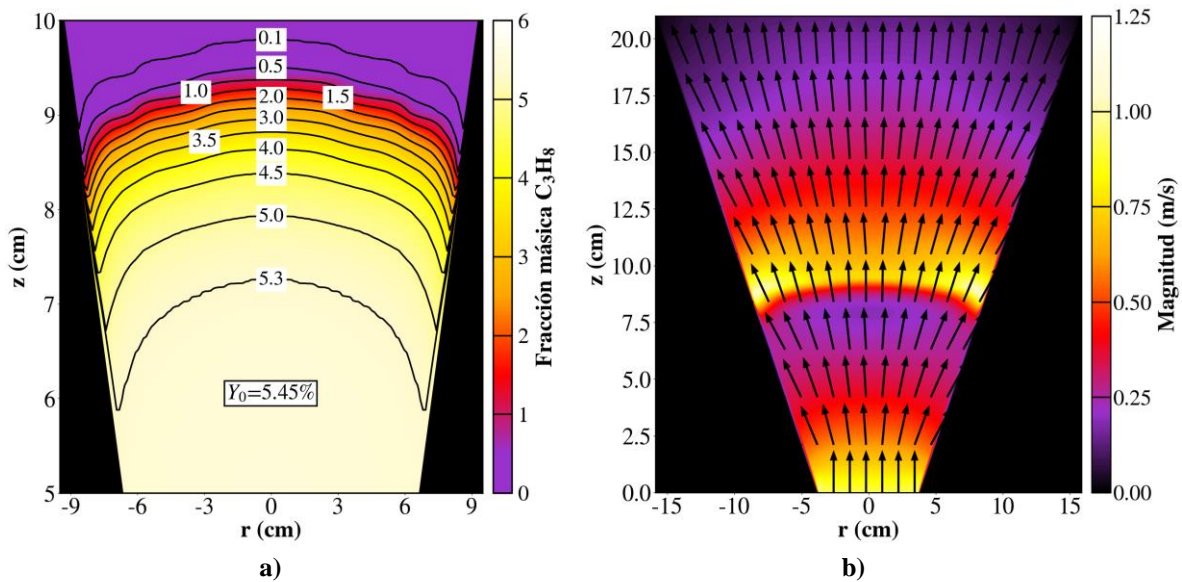


Figura 4.22: Para reactor de 30° y $\varphi = 0.9$ luego de 36 minutos de ignición, campos de a) Fracción mática de propano b) Velocidad.

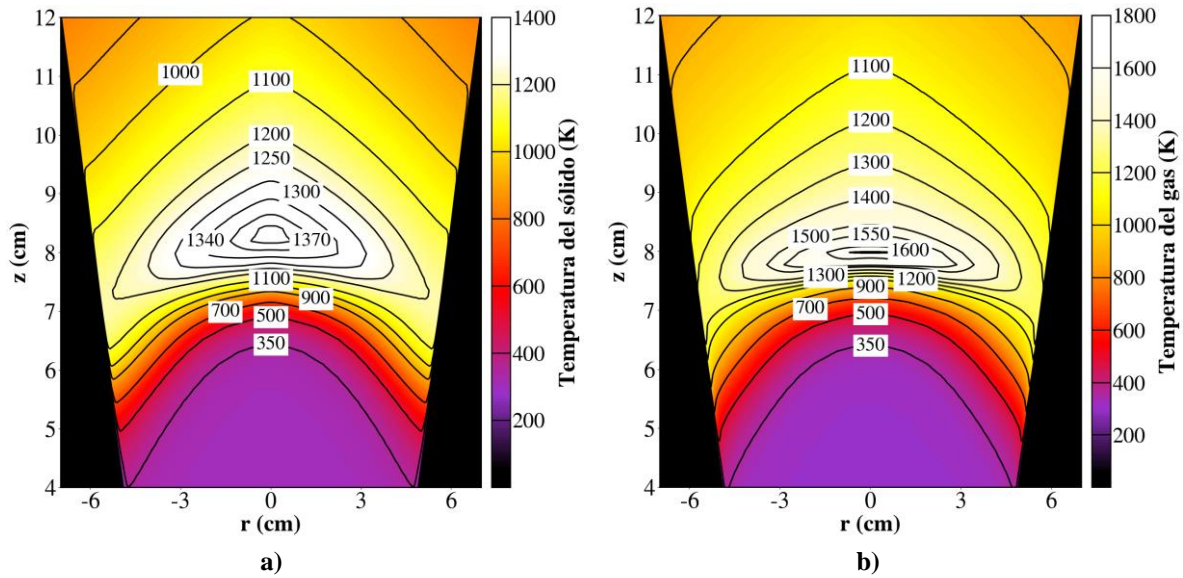


Figura 4.23: Para reactor de 15° y $\varphi = 1$ luego de 40 minutos de ignición, campos de **a)** Temperatura del sólido **b)** Temperatura del gas.

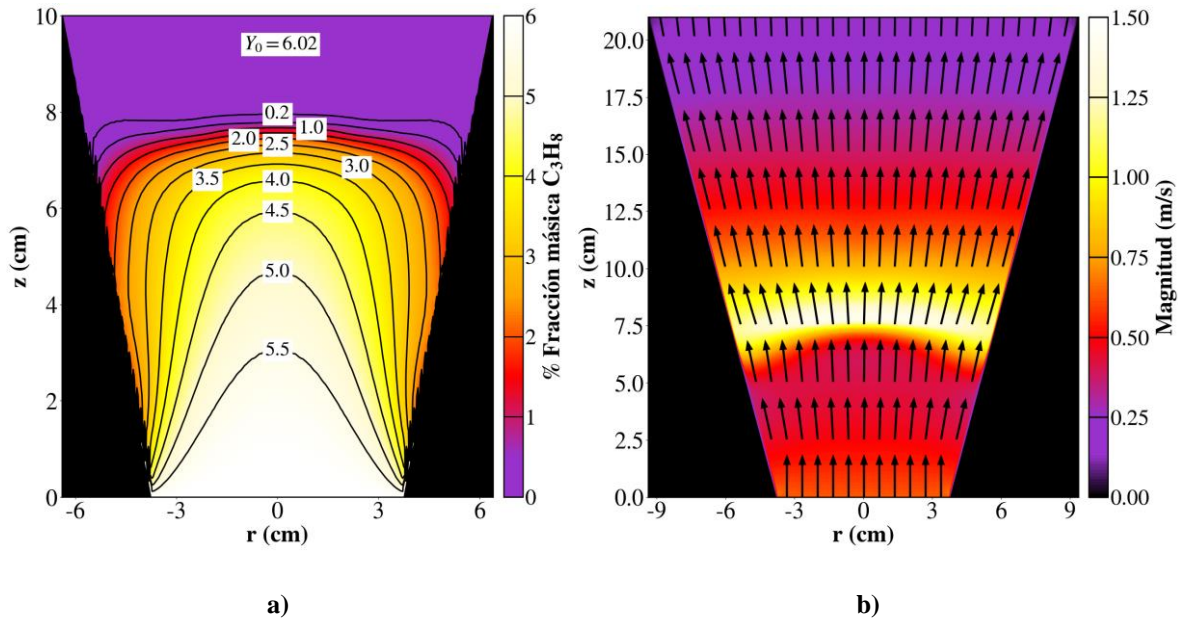


Figura 4.24: Para reactor de 15° y $\varphi = 1$ luego de 40 minutos de ignición, campos de **a)** Fracción mática de propano **b)** Velocidad.

En contraste, el de 15° muestra una zona de alta temperatura más contraída y parecida a la del reactor cilíndrico. Por otro lado, el campo de la especie de propano marca gran diferencia ya que asume la geometría de la llama, exhibiendo líneas de contorno curva, significando que se consume primeramente en los costados y por último en el centro del reactor. El campo de velocidades muestra la naturaleza difusiva de la geometría divergente, con velocidad decreciente desde la entrada de la mezcla, hasta el aumento de magnitud significativo en la zona de combustión (casi el

doble de la magnitud de entrada), para luego nuevamente decrecer drásticamente gracias al aumento de área transversal. Este comportamiento es más acentuado para el reactor de 30° , que en contraste con el de 15° alcanza muy bajas temperaturas luego de la zona de combustión a pesar de tener mayor caudal de entrada. Así mismo, es notorio como en un plano transversal la magnitud de velocidad es mayor en el centro y menor hacia las paredes.

La diferencia radial de temperatura entre el centro y la media distancia hacia la pared fue estudiada experimentalmente para el reactor de 30° , lo cual se exhibe en la **Figura 4.25** unidimensional y bidimensionalmente. Esto se realiza con la T5 que se encuentra dentro de la protección cerámica junto con T2. Se asume que la temperatura recolectada por T5 es axisimétrica, por lo cual se muestra una contraparte simétrica T5'. Para los 2000 segundos, el frente de combustión se encuentra lejos de las termocuplas, a los 3700 segundos las alcanza rápidamente con T5 incrementando su temperatura antes que T2, con una diferencia máxima de 380 K. Luego, una vez que la pendiente de la curva cambia, mostrando que el frente se desplaza más allá, T2 supera a T5. Un reactor de cilindro se asume que el frente es plano, con la mayor temperatura en el centro y que ésta decrece hacia las paredes de acuerdo con las pérdidas caloríficas. Sin embargo, en un reactor divergente, como se vio en la **Figura 4.21**, la llama existe en forma cóncava con lo cual al avanzar aguas arriba, son los costados del medio poroso los cuales se calientan inicialmente.

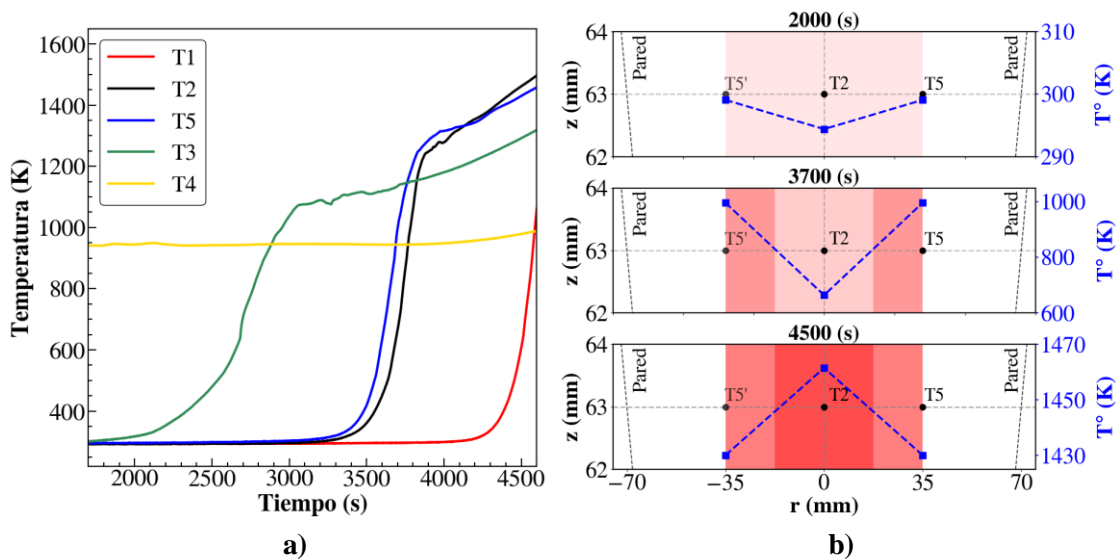


Figura 4.25: Perfil térmico de termocuplas para ensayo de relación de equivalencia 1, reactor 30° y visualización bidimensional de la diferencia de temperatura radial.

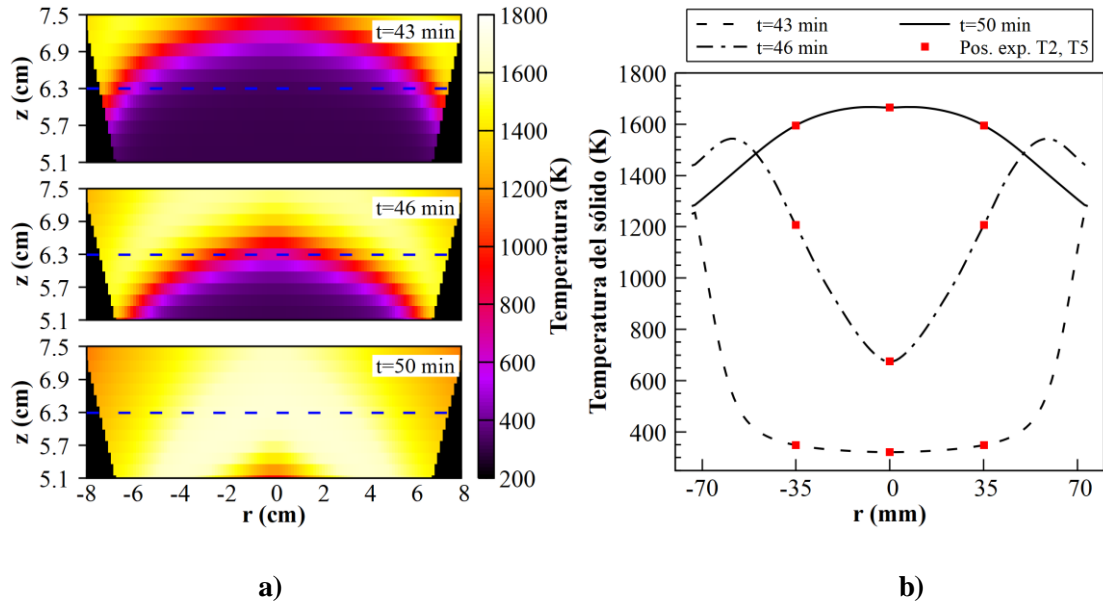


Figura 4.26: Para reactor de 30° : **a)** Visualización bidimensional numérica de campo de temperatura del sólido, **b)** Temperatura del sólido numérica en $z = 63 \text{ mm}$, en rojo, las posiciones experimentales de T2, T5 y T5'.

Como ya se expuso anteriormente, el frente de combustión dentro de un reactor divergente es cóncavo y avanza con esa geometría aguas arriba, como se aprecia en la predicción numérica de la **Figura 4.26 a)**, una vez más ratificando el comportamiento experimental antes expuesto. Asimismo, se reprodujo la **Figura 4.25 b)** utilizando las ubicaciones experimentales de las termocuplas T2 y T5 en rojo y trazando las curvas de temperatura del sólido a una altura de 63 mm obteniéndose un efecto muy similar, solamente que la diferencia máxima entre estas dos termocuplas resulta mayor en la simulación que en el ensayo, lo cual sugiere que el modelo sobre estima la curvatura del frente dentro del reactor. No obstante, el acercamiento es bastante bueno.

Con tal de comparar cómo afecta el ángulo de divergencia al comportamiento del frente de combustión, se simula para una velocidad de 0.7 m/s y $\varphi = 1$ ambos reactores divergentes. Se simula por una ventana de 50 minutos y se exponen los perfiles de fase gaseosa y sólida en la **Figura 4.27**, cada 10 minutos. Lo que se ve a primera vista es que el frente de combustión en el reactor de 15° es capaz de moverse más rápido con su posición final alcanzando los 6.51 cm , mientras que para el reactor de 30° los 7.98 cm . Otro punto es el perfil de la zona post reacción en donde se puede ver que para el de 30° se mantiene una forma de arco, mientras que para el de 15° se tiene que la curva decrece de manera más rápida conforme se avanza a la salida. Esto puede ser explicado por el mayor tiempo de residencia que tienen los gases postcombustión dentro del reactor gracias al mayor área transversal.

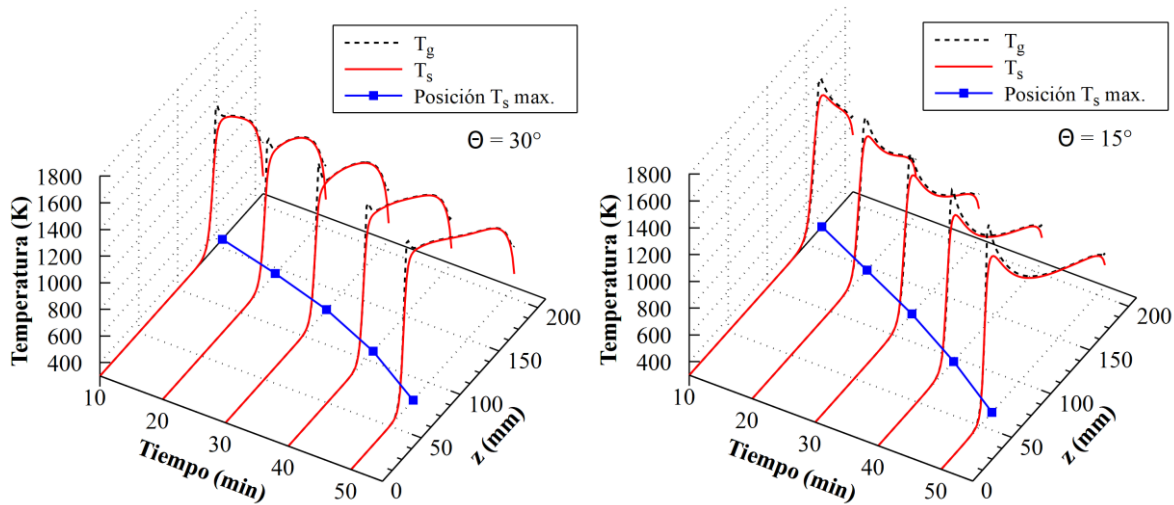


Figura 4.27: Desarrollo temporal del perfil de combustión a través de reactores divergentes, llamas con $u_0 = 0.7 \text{ m/s}$, $\phi = 1$.

Más a fondo, en la **Figura 4.28**, se ilustra la evolución de la temperatura y de la velocidad del frente de combustión en función del largo del reactor. Es claro que el comportamiento se asemeja a lo lineal en el reactor de mayor ángulo y de tipo exponencial en el de menor, además de que las temperaturas en el de 15° siempre son mayores. De la mano de la temperatura, la velocidad del frente se ve afectada con la divergencia, y es de destacar cómo para el comienzo del desplazamiento de la llama luego de la ignición, sobre todo para el reactor de 30° , su velocidad empieza en los $-1.5 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$, mientras que el de 15° empieza en $-2.6 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$. Esto se da por que la llama tiene que calentar mayor volumen de esferas antes de poder empezar a moverse, además luego de la ignición, el tiempo de formación o desarrollo de la llama es mayor. Por último, se nota que la curvatura de la llama es más pronunciada en el reactor de 15° , lo cual es probablemente debido a la velocidad la cual es mayor aguas arriba en diámetros menores, no así en el de 30° , cuya caída de velocidad es más drástica aguas abajo, gracias a lo cual su geometría es más plana aguas abajo y angular aguas arriba. La diferencia de temperatura máxima alcanzada para el sólido entre inicio y término es de 500 K para el reactor de 30° y 454 K para el de 15° . Por otro lado, se tiene el tamaño de la curva de nivel de la zona de temperatura máxima, lo cual en el de 30° es mucho más grande y desplegado a lo ancho del arco de llama gracias al mayor tamaño del reactor, lo que indica que la temperatura cercana a la pared es más alta. Esto es apreciable en la **Figura 4.29** en donde se grafica la temperatura del gas y del sólido en el plano radial, esto hecho para las ubicaciones de temperatura máxima del sólido en z . En esta zona, comparando entre reactores, la diferencia de temperatura entre fase gaseosa y sólido es mucho mas grande para el de 15° , en específico 140 K de diferencia, mientras que para el de 30° , son aproximadamente 30 K .

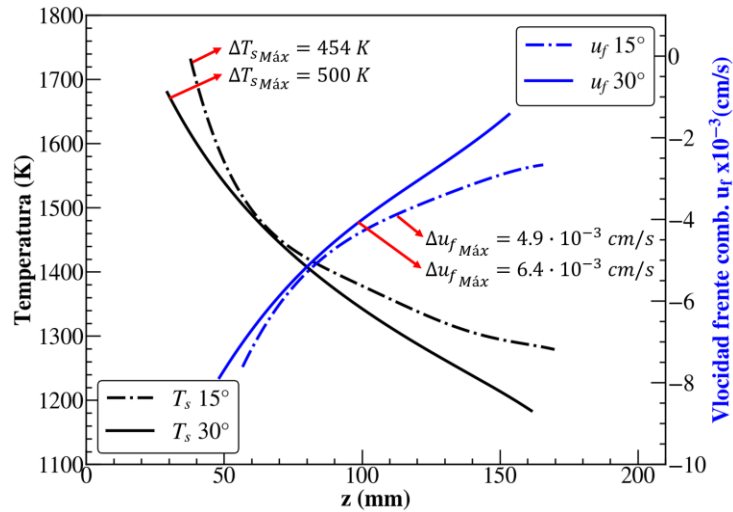


Figura 4.28: Comportamiento de la temperatura y velocidad del frente de combustión a lo largo de reactores divergentes, $u_0 = 0.7 \text{ m/s}$, $\varphi = 1$.

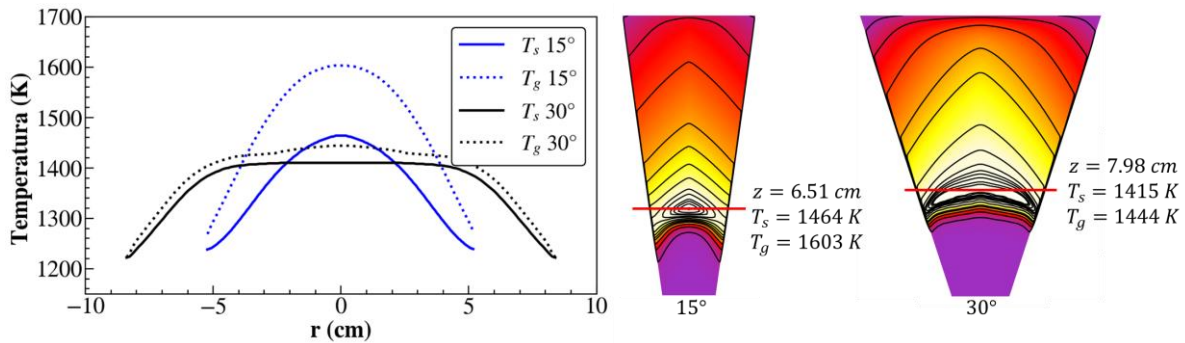


Figura 4.29: Temperaturas en plano de ubicación del frente de combustión y visualización bidimensional de campo de temperatura del sólido.

La **Figura 4.30** muestra la potencia térmica generada por la combustión por unidad de área de material poroso. Considerando una llama de 0.8, con velocidades de ingreso de mezcla de 0.5 m/s y 0.35 m/s, se tienen potencias nominales de 3.9 kW y 1.8 kW, respectivamente, esto tomando en cuenta el poder calorífico inferior del combustible, es decir, asumiendo que el agua continúa en forma de vapor. La potencia por unidad de área transversal en el reactor cilíndrico claramente es constante, pero para los reactores divergentes decae bruscamente con el cuadrado del radio de la sección. En el caso de 15° de divergencia, para cualquier potencia, entre entrada y salida se tiene una disminución del 83%, mientras que para el de 30° 94%. Entonces, a un reactor de mayor ángulo le va a costar bastante poder precalentar el medio poroso en dirección aguas arriba empezando desde la superficie y le será bastante más fácil en la sección inferior del reactor, esto explica el fenómeno de alza de temperatura y aceleración del frente de combustión que se vio en la **Figura 4.28**.

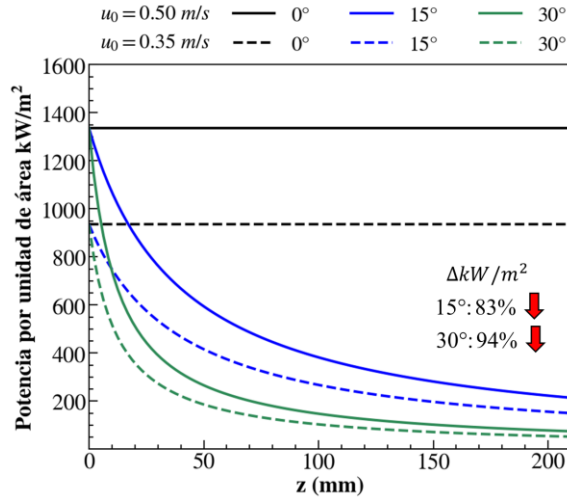


Figura 4.30: Variación de la potencia térmica de reactores por unidad de área en eje z, con $\phi = 0.8$.

En la **Figura 4.31**, se muestra cómo afecta la velocidad de filtración desde la entrada a la posición del frente luego de 40 minutos de iniciada la ignición. En consecuencia, del aumento de esta velocidad, disminuye la capacidad de desplazamiento aguas arriba de la llama hasta el punto de que no es capaz de sumergirse y se genera el blowout. Se puede notar de igual manera que la curvatura de la llama, específicamente de la zona de precalentamiento, se vuelve más pronunciada en forma de cono al aumentar la velocidad, debido a que la velocidad del frente de combustión se ve cada vez más sobrepasada por la de premezcla. Respectivamente, para $u_0 = 0.6 \text{ m/s}$, el frente alcanza una velocidad de $4.9 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$, para $u_0 = 0.7 \text{ m/s}$ alcanza $4.37 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$, y 0.8 m/s alcanza los $2.9 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ en sus respectivas posiciones.

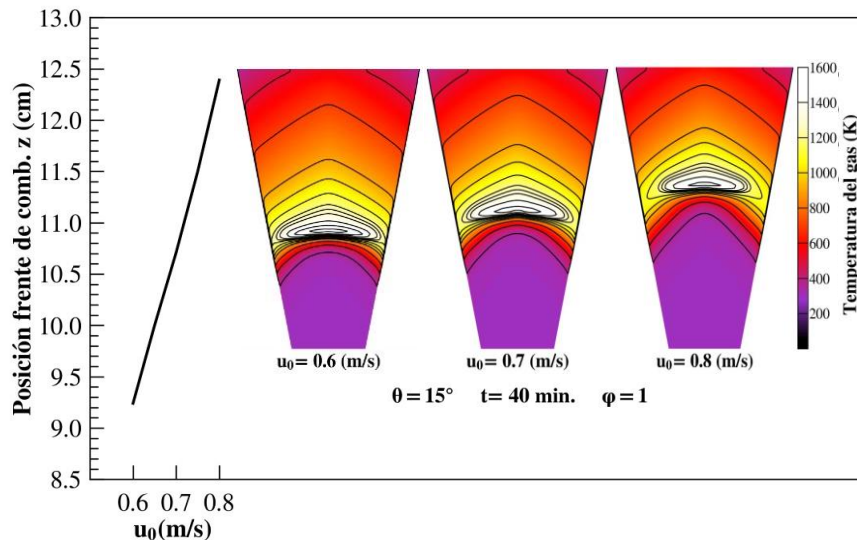


Figura 4.31: Variación de la posición de la llama y distribución de temperatura dentro de reactor de 15° para distintas velocidades de ingreso de mezcla.

Se puede apreciar en la **Figura 4.32**, que claramente el aumentar el ángulo de divergencia de las paredes del reactor influye positivamente en el rango de velocidades admisibles dentro del reactor. Para una llama estequiométrica, en el caso de 0° de divergencia el rango posible para que la combustión pueda ocurrir y desplazarse por el medio parte en 0.1 m/s y termina en 1 m/s . Mientras tanto, en ambos reactores divergentes el rango inicia en 0.2 m/s y, para el de 15° y 30° termina en 1.3 y 1.6 , respectivamente. Claramente, el hecho que la velocidad del flujo entrante disminuya a lo largo del reactor permite que se puedan utilizar velocidades mayores sin riesgo de blowout. El límite inferior aumenta conforme se agranda el ángulo debido al aumento de pérdidas energéticas en la superficie del medio poroso, el cual inicia helado. El tener que calentar tanto volumen de esferas de alúmina requiere una mayor potencia por unidad de área. Si bien se pueden alcanzar altas temperaturas en las velocidades mayores, la magnitud de la velocidad del flujo entrante se vuelve predominante ante el desplazamiento de la llama.

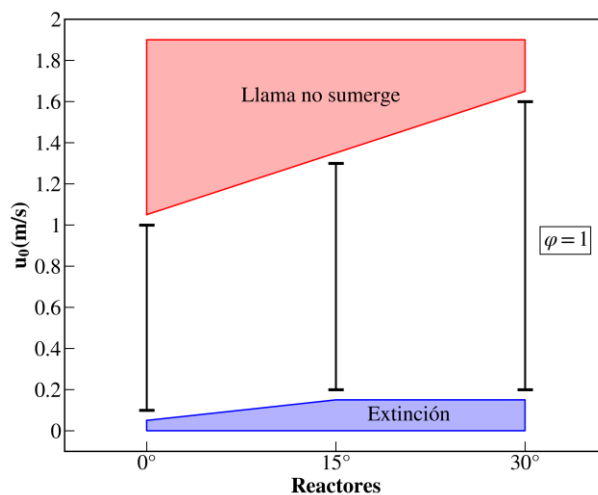


Figura 4.32: Límites de flabilidad para reactores, con llama $\varphi = 1$, ignición en porción superior del reactor.

Más a fondo, en la **Figura 4.33** se muestra el fenómeno de flashback y blowout interpretado numéricamente. En la situación de blowout se aprecia el desplazamiento de la llama aguas abajo hasta el punto de que la fase gaseosa deja de tener un peak predominante sobre el sólido, luego el calor acumulado en la fase sólida va disminuyendo debido al intercambio energético con la superficie del reactor y el volumen de medio poroso helado circundante. Por el contrario, en una situación de flashback, ya en conocimiento de la aceleración del frente de combustión aguas arriba en un reactor divergente, la llama se sitúa violentamente al inicio del dominio a alta temperatura, con lo que ya no es apreciable la forma cóncava de la llama, en este punto lo único que evita la salida de la llama es la condición de borde de ingreso de mezcla a 300 K .

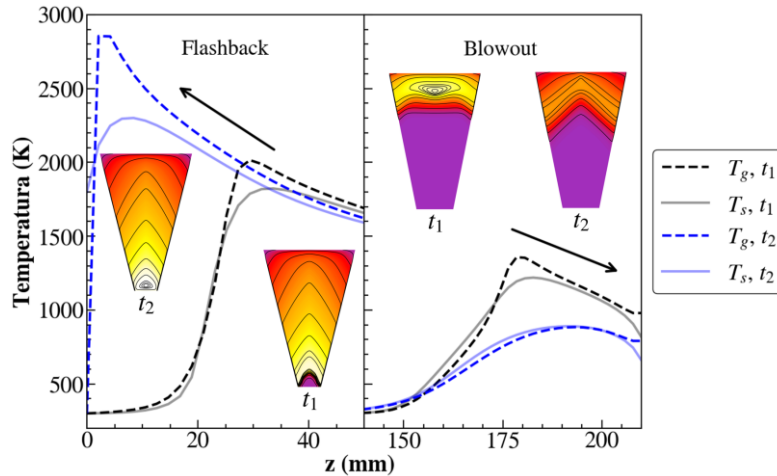


Figura 4.33: Interpretación de flashback y blowout en reactor divergente.

La **Figura 4.34**, muestra el cambio en la velocidad del frente de combustión a través de cada reactor divergente. Para el reactor de 15° , $\varphi = 1$ y 0.8 muestran un incremento significativo en la velocidad avanzando aguas arriba con la medida entre T3 y T2 siendo la mayor con $3 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ y $5 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$, respectivamente. Una leve desaceleración es vista entre T1 y T2, que se debe a las mayores velocidades de filtración presentes en la entrada y la barrera física que significa la trampa de llama. Bajo 0.6, se muestra la desaceleración de las llamas régimen aguas abajo, dentro de lo cual la llama 0.4 logra alcanzar la velocidad 0 entre T4 y T3, pero la llama 0.3 sale del reactor a una velocidad de $1.6 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$, levemente acelerando, lo que sugiere un cese de la combustión a causa de pérdidas energética. A pesar de que aparezca como velocidad 0 para las llamas de 0.5 y 0.6, éstas se desplazaron lentamente hacia el punto de estabilización una vez eran seteadas, pero no más allá de una termocupla por lo cual no es posible calcular una velocidad.

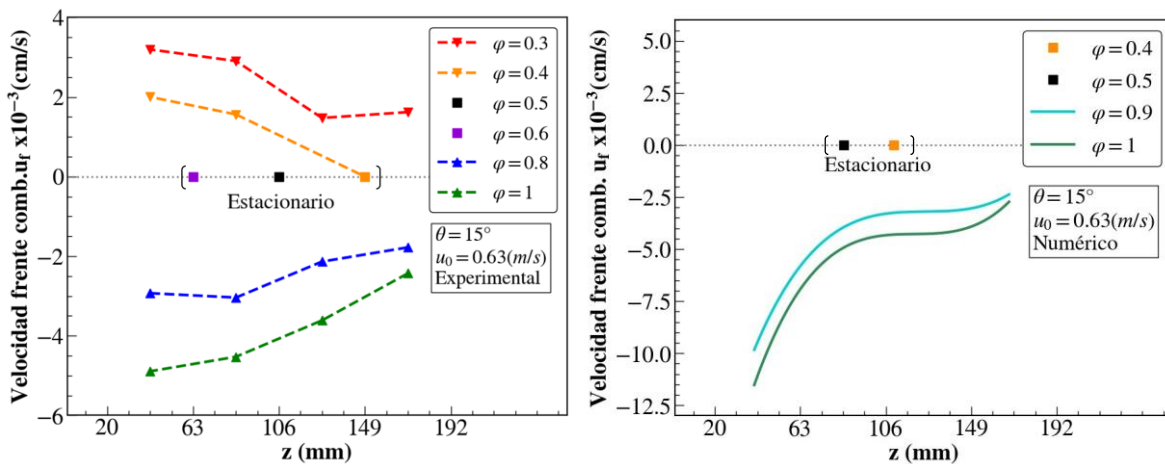


Figura 4.34: Velocidades de frente de combustión experimental y numérico para reactor de 15° .

Numéricamente se halla que fue posible simular en régimen aguas arriba las llamas $\varphi = 1$ y 0.9, ambas con un comportamiento muy similar entre sí, pero con gran desviación de resultados en la

porción inferior del reactor con respecto a los experimentales. Se hallan dos llamas estacionarias, aunque por un periodo muy corto, para $\varphi = 0.5$ y 0.4 , iniciando la ignición desde la ubicación de la termocupla T2. Estas llamas se encuentran muy cerca entre sí y difieren en poca medida de sus temperaturas máximas, y no se ubican en la posición experimental. Más allá de 0.4 la llama se extingue muy rápidamente.

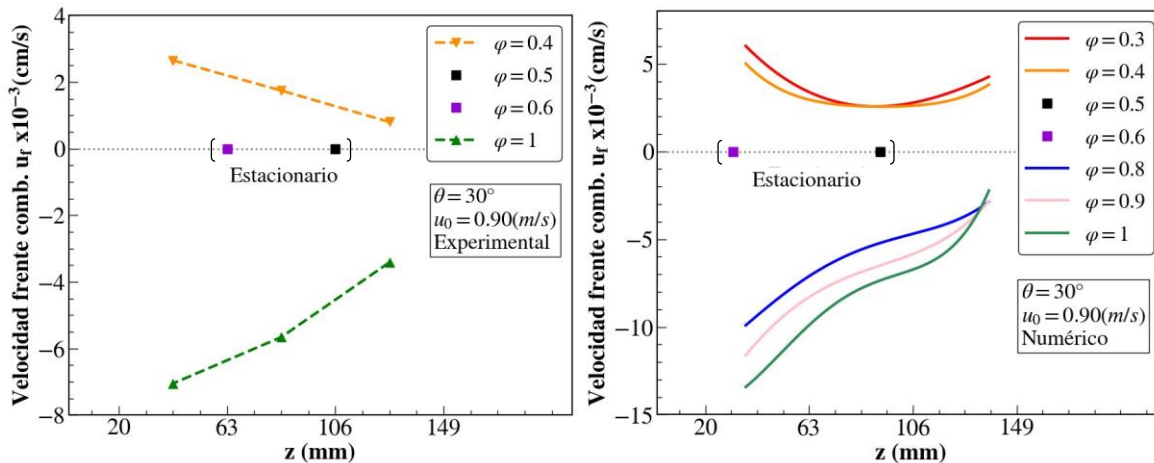


Figura 4.35: Velocidad del frente de combustión en función de la relación de equivalencia para los reactores divergentes a lo largo del eje axial, izquierda experimental, derecha numérica.

Similarmente, para el reactor de 30° (**Figura 4.35**) y llama estequiométrica se puede ver que se alcanza una velocidad de $6 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$ entre las T1 y T2. La velocidad para las llamas de 0.7 y 0.8 no fue posible de medir, debido a que estas, luego del medio estar precalentado se movían aguas arriba generando riesgo de flashback, además se puede ver que la llama de 0.4 sale del reactor con $0.8 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$. Numéricamente, la velocidad de las llamas 0.5 y 0.6 alcanza el valor estacionario una vez se desplazan lentamente hasta este punto, mientras que las llamas 0.3 y 0.4 demuestran un desplazamiento constante hacia afueras del reactor, sin embargo, en comparación con lo experimental, en la última sección del reactor se aprecia que la temperatura decrece y mueve su peak un tanto más rápido, similarmente a lo ocurrido experimentalmente con el reactor de 15° . Para la llama estequiométrica la pendiente de la velocidad es muy similar entre T4-T3 y T3-T2 y de hecho los valores son muy cercanos, no obstante, entre T2 y T1, se ve una gran desviación debido a que la llama al llegar al borde del dominio se acelera grandemente. En el régimen aguas arriba se pudo simular llamas de 0.9 y 0.8 , algo que no fue posible desde la superficie del reactor experimentalmente. Se puede ver que estas llamas replican el comportamiento de la llama estequiométrica, pero con menor magnitud.

Como se puede apreciar en las **Figura 4.11**, **Figura 4.12**, **Figura 4.14**, experimentalmente, luego de configurar la relación de equivalencia deseada y que la llama se desplace, la temperatura máxima permanece constante y fija en una termocupla mostrando un perfil plano, esto indicado por la gráfica de posición de llama en el eje z. Una estabilización del frente mientras más aguas abajo sea, será a menor temperatura, lo cual implica menores emisiones contaminantes debido a la inhibición de los mecanismos que producen

NO_x y material particulado, que se dan a alta temperatura y tiempo de residencia de los gases producto. Los estudios disponibles en la literatura no informan sobre tiempo de estabilización, sin embargo, el presente estudio muestra combustión en un punto fijo por más de una hora sin cambios significativos. Después de esto, el reactor es apagado.

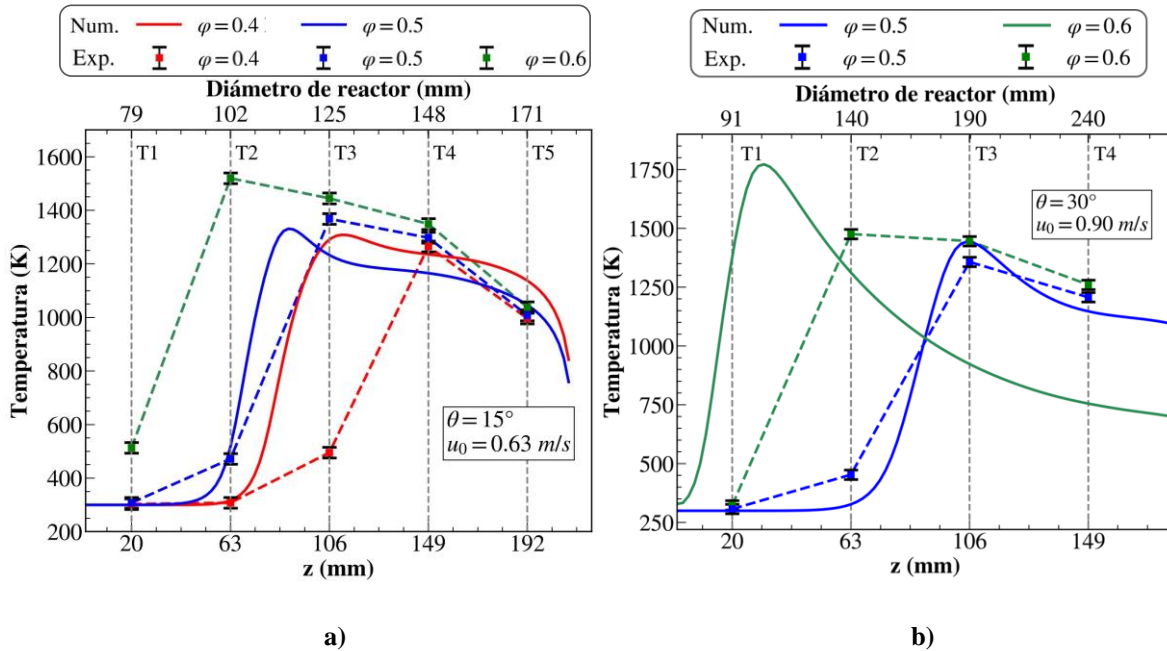


Figura 4.36: Posiciones de frentes de combustión estacionarios dentro de reactores divergentes de: a) 15° con $u_0 = 0.63 \text{ m/s}$, b) 30° con $u_0 = 0.90 \text{ m/s}$, para variadas relaciones de equivalencia.

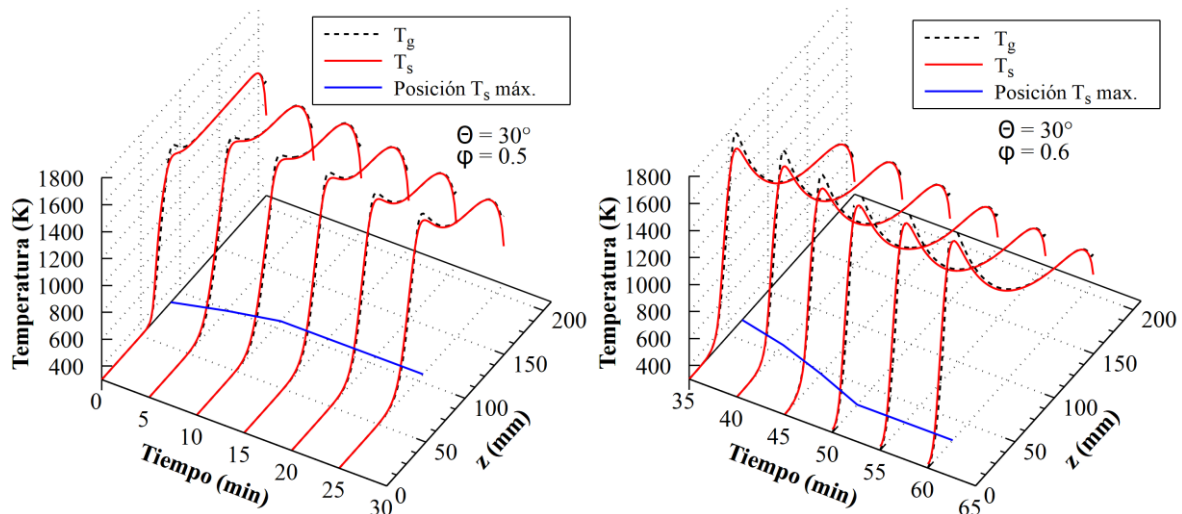


Figura 4.37: Frente de combustión estabilizado para reactor de 30° con $\phi = 0.5$ y 0.6 .

Para una velocidad de filtración de 0.63 m/s , el reactor de 15° presenta tres puntos de operación para llama estacionaria, en $\phi = [0.4, 0.5, 0.6]$, mientras que para 0.90 m/s de velocidad de filtración, el reactor de 30° tuvo dos llamas estacionarias en $\phi = [0.5, 0.6]$. Mostrado en la **Figura**

4.36, al igual que la velocidad de flujo axial, la relación de equivalencia tiene la capacidad de manipular la ubicación del frente. Para ambos reactores divergentes, más allá de 0.6 el frente se desplazaría aguas arriba generando un peligro inminente de flashback. Más pobre que 0.4 y 0.5, en el caso del reactor de 15° y 30° , respectivamente, la llama no encuentra punto de estancamiento dentro del reactor, por lo cual esta podría desplazarse por sobre la superficie y finalmente apagarse. Esta tendencia se debe a que a mayor relación de equivalencia el frente adquiere una velocidad de propagación mayor que luego procede a igualarse a velocidades de flujo de mayor magnitud. Numéricamente, para el reactor de 30° se predicen dos llamas estacionarias, para 0.5 y 0.6, sin embargo, esta última se ubica más aguas arriba que la llama experimental. En consecuencia, a esta ubicación, la temperatura es distinta y mucho más alta, pero dentro del rango obtenido en esa ubicación, como se ve en la **Figura 4.14**. Ambas llamas tienen tiempo de régimen estacionario mayor a 25 minutos de combustión sostenida a alta temperatura (visto en la **Figura 4.37**). Para el reactor de 15° se predicen dos llamas estacionarias en 0.5 y 0.4, muy cercanas entre sí, sin embargo, esta estabilidad se da por un tiempo corto (~ 10 min) y no comparable con los tiempos experimentales, por lo cual se reconoce que para este modelo existe una gran desviación. Dentro de todo, es de destacar que experimentalmente se desconoce la ubicación específica del frente de combustión ya que esto está de la mano con la cantidad de termocuplas usadas, por lo cual se desconoce esta propiedad y también la temperatura máxima.

4.3 Gases Producto

Es importante analizar cómo se comportan los gases producto dentro de los reactores, tanto en su etapa de formación como en post combustión. De acuerdo con la reacción de oxidación de propano, es esperable que se forme CO_2 , H_2O y que quede un remanente de oxígeno, además del nitrógeno que siempre se encuentra presente. En la **Figura 4.38**, **4.40** y **4.41** se pueden ver los campos de fracciones máscas de los gases producto.

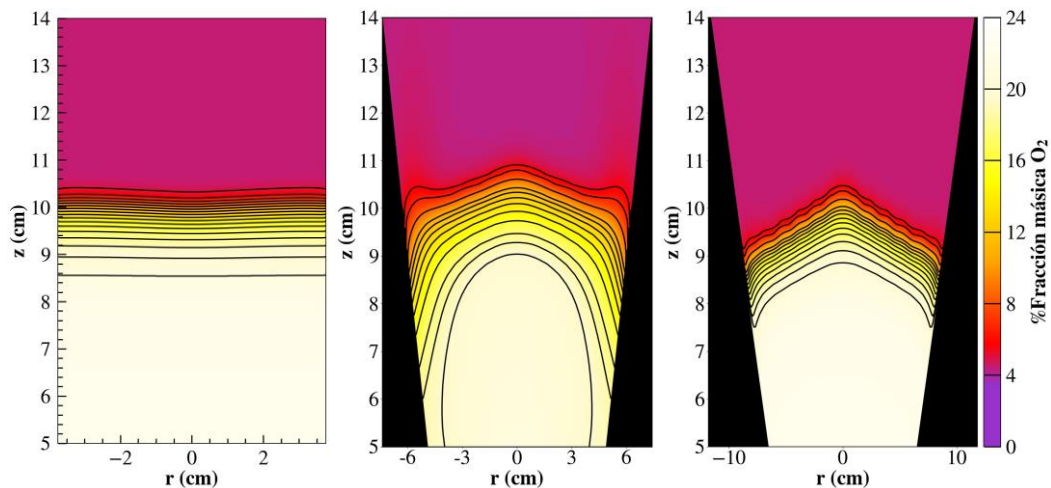


Figura 4.38: Campos de fracción máscica de O_2 con $u_0 = 0.5$ m/s y $\phi = 0.8$. De izquierda a derecha: 0° , 15° , 30° .

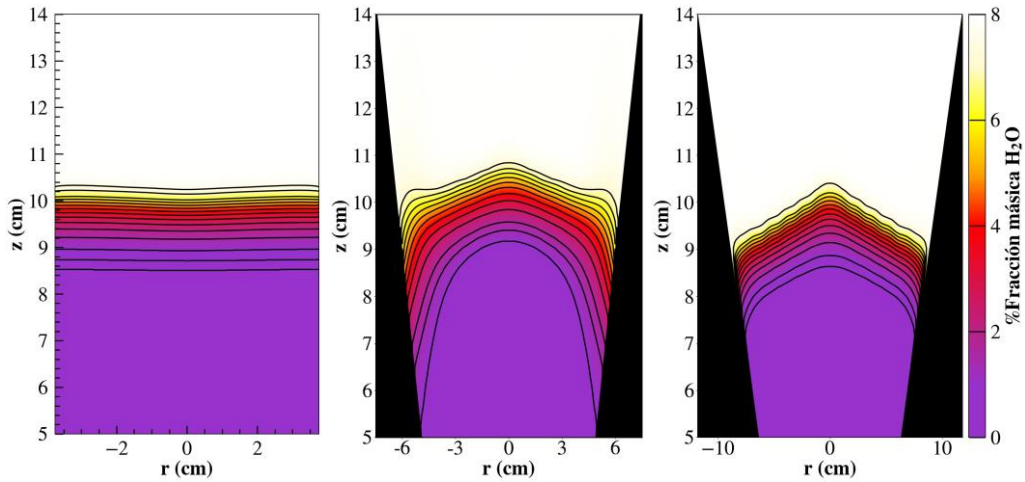


Figura 4.39: Campos de fracción mástica de H_2O , con $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$ y $\varphi = 0.8$. De izquierda a derecha: 0° , 15° , 30° .

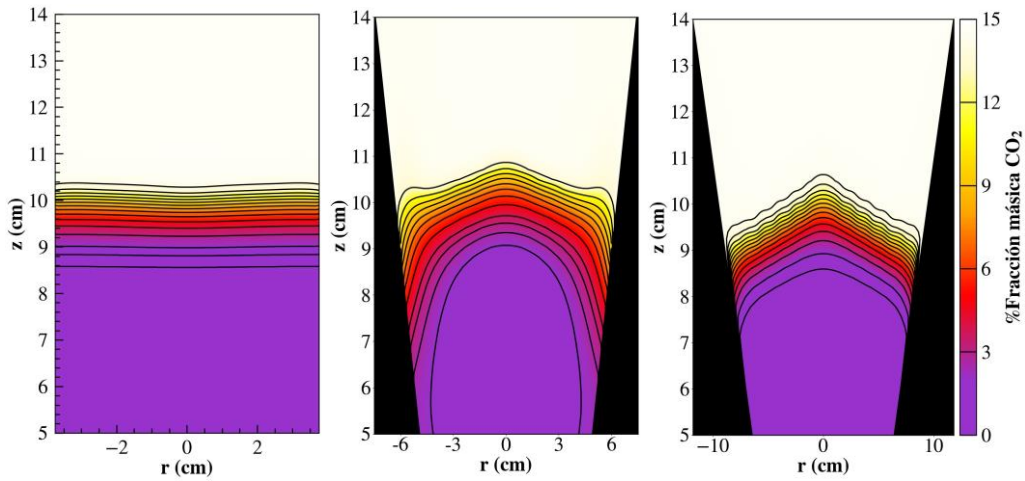


Figura 4.40: Campos de fracción mástica de CO_2 , con $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$ y $\varphi = 0.8$. De izquierda a derecha: 0° , 15° , 30° .

Para el caso de estudio, se tiene una llama de relación de equivalencia 0.8 y $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$, por lo cual el oxígeno entra con una fracción mástica de 22.17% y deja el reactor con 4.5%, el agua llega a formar 7.95% de la mezcla final, mientras que el CO_2 14.63%. Por supuesto esto es en términos ideales, ya que en la realidad un porcentaje de la mezcla final puede estar compuesto por gases que no alcanzaron a oxidarse o que son parte de mecanismos de alta temperatura, como NO_x y CO [55].

Los campos de los gases producto exhiben líneas de contorno conforme a lo hallado anteriormente respecto a la forma del frente de combustión. Se aprecia una formación completa de los gases y un consumo de oxígeno, así como un remanente de este a la salida de los reactores. Se puede ver diferencia entre la distribución entre el reactor de 15° y 30° , en donde la formación de agua y CO_2 empieza antes de la zona de reacción principal por las paredes y luego hacia el centro, mientras que este comportamiento también se da en el reactor de 30° , pero de manera más suave, en donde si

bien existe una formación cóncava de los productos, esto se da de manera más compacta. Los anchos de las zonas de reacción, medidos en el eje central, corresponden a 1.8 cm para el cilíndrico, 1.9 cm para el de 15° y 2.0 cm para el de 30°.

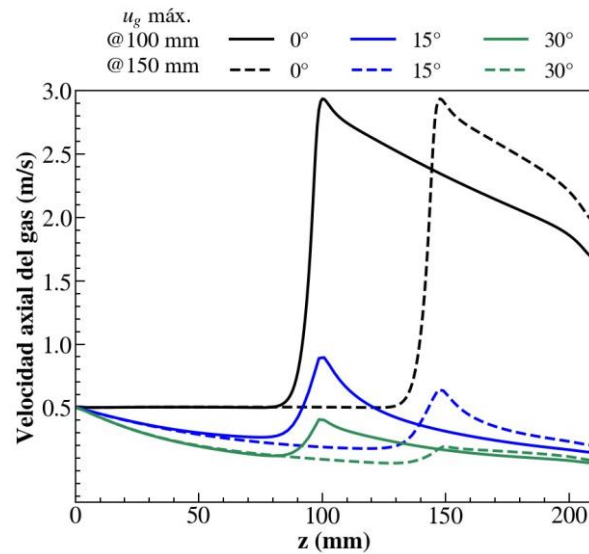


Figura 4.41: Magnitud de velocidad de fase gaseosa sobre eje central para reactores cilíndrico y divergentes, máximos ubicados en $z = 100$ mm y $z = 150$ mm con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$.

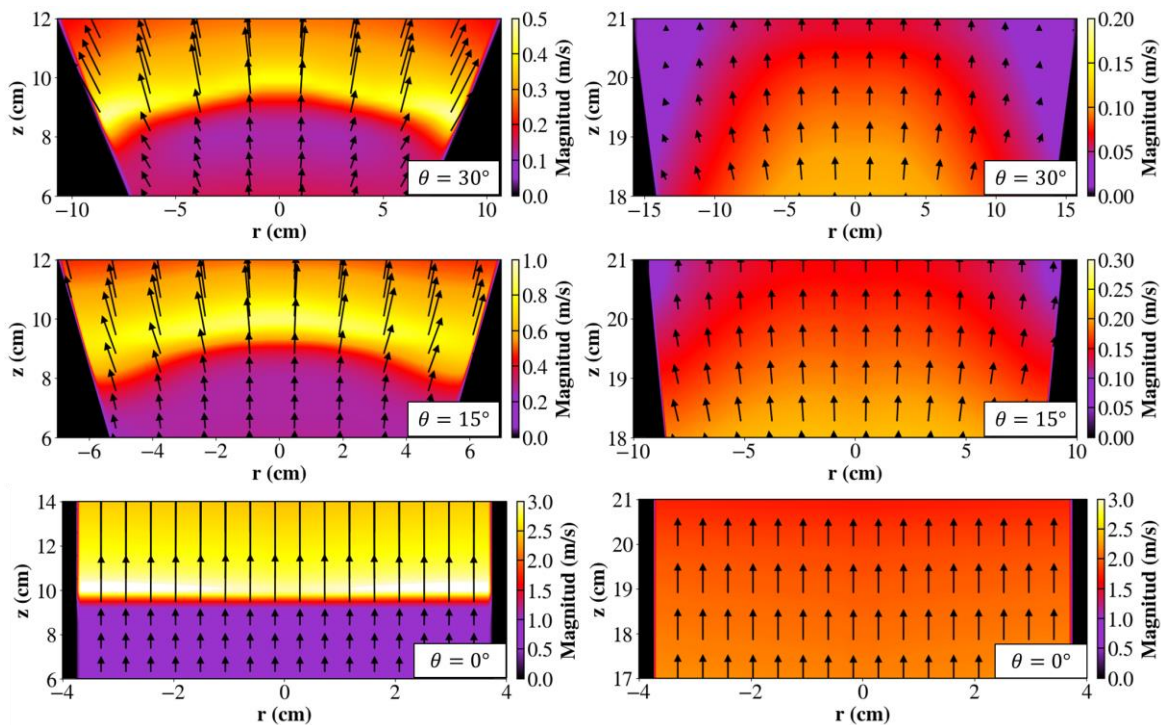


Figura 4.42: Campos vectoriales y de magnitud de velocidad del gas para reactores con ubicación de máximos en $z = 100$ mm, con $u_0 = 0.5$ m/s y $\varphi = 0.8$.

En la **Figura 4.41** se exponen perfiles de magnitud de velocidad a lo largo del eje central de los reactores, con una velocidad de ingreso de la mezcla de 0.5 m/s . En el reactor cilíndrico desde el ingreso de la mezcla hasta el punto en que esta aumenta drásticamente debido a la aproximación al frente de combustión se mantiene sin alteraciones, algo muy distinto a lo que sucede en los reactores divergentes, en donde esta velocidad decae progresivamente debido al aumento del área transversal. Una vez ingresando a la zona de reacción, gracias al cambio en la temperatura del gas, lo cual afecta la densidad y viscosidad, hay un aumento de la velocidad, para luego volver a decaer hasta la salida. Estos fenómenos se pueden apreciar más a fondo en la **Figura 4.42**. En la **Tabla 3**, se presentan los valores obtenidos de las llamas estudiadas en la **Figura 4.41**. Se nota que el tiempo de residencia en el reactor de 30° se encuentra aproximadamente en una relación de 1:10 con el tiempo del reactor cilíndrico cuando el frente se ubica en $z = 100 \text{ mm}$, claramente la distancia desde la superficie a la ubicación del frente de combustión afecta este tiempo, tanto por la distancia como por las temperaturas que se alcanzadas. Esto anterior se corrobora comparando los tiempos de residencia en la ubicación $z = 150 \text{ mm}$, en donde estos reactores se encuentran en una relación 1:18. Claramente las temperaturas alcanzadas por el gas en el reactor cilíndrico son bastante más altas que en los divergentes, de hecho, en $z = 150 \text{ mm}$ son un 24% mayores que para el reactor de 15° . Esto, agregado al hecho de que desde la entrada no cambia la velocidad de filtración, favorece a que se alcance una velocidad de casi 3 m/s , en consecuencia, los tiempos de residencia son bajísimos, ni siquiera superando los 50 ms .

El hecho que haya un aumento en el tiempo de residencia de los gases producto al interior del reactor, ayuda a que se puedan completar las reacciones y así reducir las emisiones contaminantes. En este caso, al trabajar con mezclas pobres, el posible CO producido puede ser oxidado por el oxígeno remanente de la reacción, favoreciendo que el CO pase a CO_2 . Ahora, si se trata de una oxidación parcial, es decir, trabajar con mezclas ricas en combustible, se producirían reacciones endotérmicas de reformado, generando H_2 y CO , las cuales son bastante lentas, por lo cual extender en lo más posible el tiempo de residencia de los gases producto en un ambiente de alta temperatura, favorece a que se pueda generar, por ejemplo, un gas de síntesis más rico en estas especies [56].

Tabla 3: Características de las llamas estudiadas y tiempo de residencia de gases producto.

Reactor	Ubicación de magnitud de velocidad máxima	Temperatura máxima del gas	Magnitud de velocidad máxima	Magnitud de velocidad a la salida	Tiempo de residencia de gases producto
0°	100 mm	1822 K	2.93 m/s	1.68 m/s	47 ms
	150 mm	1822 K	2.93 m/s	1.98 m/s	24 ms
15°	100 mm	1383 K	0.89 m/s	0.15 m/s	211 ms
	150 mm	1470 K	0.63 m/s	0.20 m/s	144 ms
30°	100 mm	1285 K	0.40 m/s	0.063 m/s	475 ms
	150 mm	1397 K	0.19 m/s	0.086 m/s	435 ms

El rol que juega la temperatura del gas en la formación de los NO es bastante importante debido que una reacción a alta temperatura va a favorecer a la producción de esta especie y viceversa. Por lo cual al trabajar con un reactor divergente es importante ubicar el frente de combustión en una zona en donde se favorezca la combustión completa de la premezcla, que signifique un alto tiempo de residencia de los productos y que no sea a alta temperatura (lo cual va de la mano con la ubicación). No obstante, en un reactor divergente al tener una mayor superficie de intercambio de calor con el exterior, la temperatura del gas a la salida decrece bastante en comparación con un reactor cilíndrico.

La **Figura 4.43** muestra la evolución del número de Reynolds en función de la velocidad axial de la fase gaseosa, con el frente de combustión ubicado en $z = 100 \text{ mm}$ y $z = 150 \text{ mm}$. Para la configuración escogida los regímenes no alcanzan la turbulencia, ya que el número de Reynolds máximo alcanzado, que se da previo a la zona de combustión, solamente llega a 95 en el reactor cilíndrico. Bajo el criterio de una porosidad de ~ 0.4 , el régimen turbulento según [57] no es alcanzado, ya que se encuentra dentro del rango inercial $25 < Re_p < 375$. Luego de la zona de reacción el número decae violentamente, esto debido a la baja en la densidad de la fase gaseosa gracias al aumento de temperatura, esto produce que hacia la salida los productos puedan fluir hacia el ambiente de manera laminar en la gran mayoría de los casos. En los reactores divergentes será muy difícil que se alcance un número de Reynolds alto, debido al decaimiento de la magnitud de la velocidad luego de la entrada.

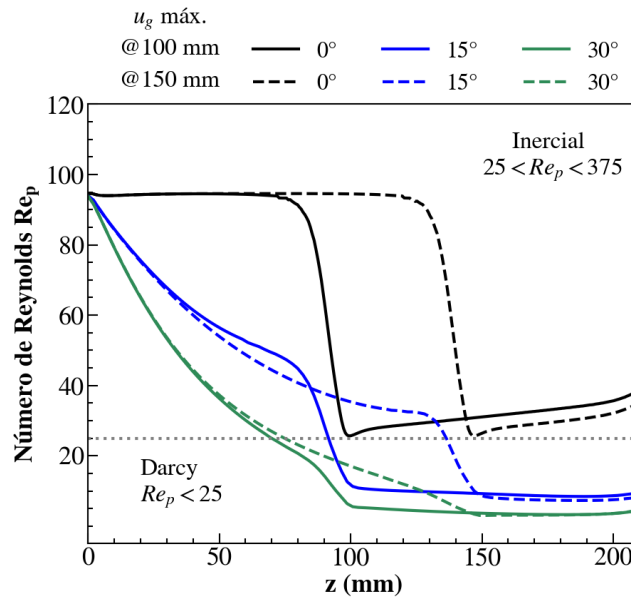


Figura 4.43: Número de Reynolds a lo largo del eje central para cada reactor con llama en posiciones $z = 100 \text{ mm}$ y 150 mm , $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$ y $\varphi = 0.8$.

4.4 Comentarios

La **Figura 4.44** muestra los límites inferiores de velocidad de la mezcla entrante de los reactores divergentes para una relación de equivalencia de 1 medidos experimentalmente. Se puede ver que para un ángulo de divergencia mayor se requiere mayor velocidad para tener combustión sostenida y para que efectivamente se pueda sumergir la llama. Para el reactor divergente de 15° el límite inferior encontrado corresponde a 0.60 m/s mientras que para el de 30° viene siendo 0.90 m/s . Este valor existe de acuerdo con dos variables: La potencia por unidad de área, en este caso de la superficie del reactor necesaria para calentar el medio y mantener la combustión, y la segunda es que la velocidad de llama laminar pueda superar la velocidad del flujo axial. Numéricamente, la ignición es realizada seteando la temperatura de una sección del sólido, con lo cual la mezcla gaseosa posteriormente logra superar la temperatura de la fase sólida y mantener la combustión. Es por esto que las dificultades de trabajar con velocidades menores a las que se presentaron experimentalmente no se manifiestan. Quizá si el medio poroso utilizado hubiera sido precalentado antes de cambiar la velocidad de flujo entrante, no se hubiera presentado tal dificultad.

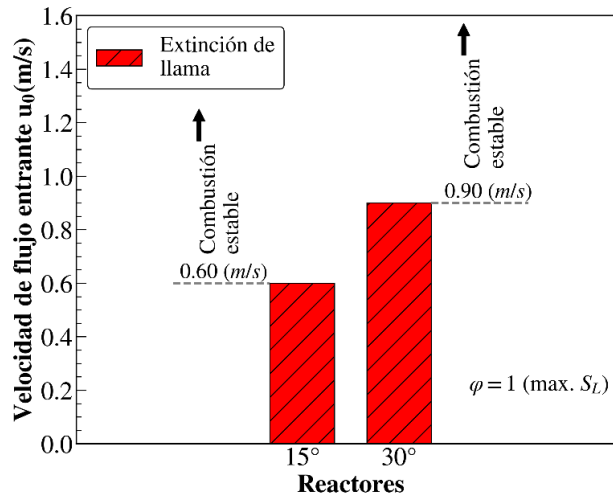


Figura 4.44: Límite experimental de inflamabilidad inferior de reactores divergentes respecto de la velocidad de flujo entrante.

Para ilustrar de manera más explícita el fenómeno de la aceleración del frente, en la **Figura 4.45** se muestran las curvas de velocidad para los tres reactores, como se dijo anteriormente, la velocidad del reactor cilíndrico tiene una diferencia despreciable, mientras que para los reactores cilíndricos la diferencia se aproxima a $3 \cdot 10^{-3} \text{ cm/s}$, con la mayor diferencia siendo para el reactor de 30° . Lo cual significa que para una mayor potencia y ángulo de divergencia el riesgo de flashback se incrementa de mayor manera. Sin embargo, gracias a la trampa de llama esto no sucedió.

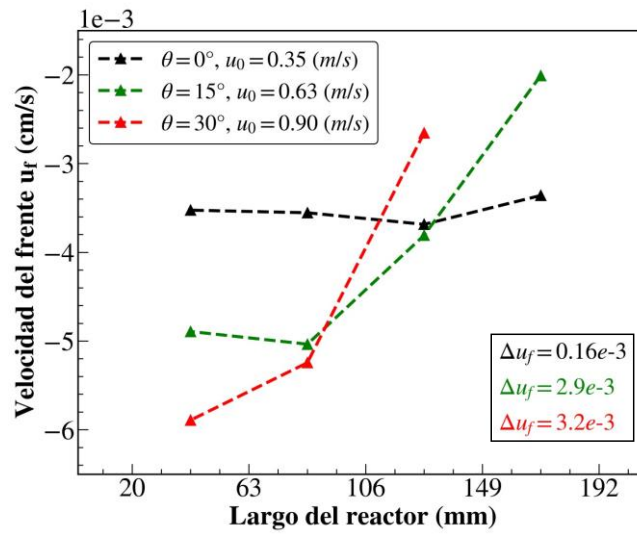


Figura 4.45: Comparación de velocidades de frente de combustión entre reactores, experimental para $\varphi = 1$.

Capítulo 5:

5 Conclusiones

El objetivo de esta investigación numérico-experimental fue analizar el comportamiento de los frentes de combustión en el uso de quemadores de medio poroso inertes divergentes, con tal de ampliar el conocimiento de la implementación de esta técnica de estabilización. Para esto se usaron tanto ensayos de laboratorio, así como la resolución numérica de los modelos matemáticos bidimensionales propuestos. Tres reactores, uno cilíndrico y dos divergentes de 15° y 30° de inclinación constituidos por esferas de alúmina fueron sometidos a pruebas experimentales en los cuales se varió la relación de equivalencia, monitoreando las temperaturas generadas por las mezclas de aire-propano mediante termocuplas. A partir de estos resultados, se realizó la contrastación numérica, con lo cual se predijeron los comportamientos del frente de combustión alcanzados con los parámetros utilizados en los ensayos además de indagar en la variación de otros como por ejemplo la velocidad de filtración, ángulo de inclinación. Por otro lado, se estudiaron los campos de temperatura, velocidad y especies químicas.

Uno de los factores más característicos hallados a través de los campos de temperatura y velocidades, es que la llama dentro del reactor divergente es cóncava. Es decir, desde un plano transversal con un avance aguas arriba se tendrá un calentamiento progresivo desde las paredes hacia el centro. En efecto, experimentalmente se percibió una diferencia radial máxima entre centro y distancia media a la pared cercana a 380 K, mientras que numéricamente alrededor de 550 K. Esto contrasta con el reactor cilíndrico en donde se halla que la distribución del sólido tiene su zona de máxima temperatura confinada en el centro y decae hacia las paredes, con su zona de precalentamiento siendo prácticamente plana. Este efecto se da gracias a los campos de velocidades, los cuales gracias a las paredes inclinadas se desarrollan de manera difusiva. La curvatura de la llama depende grandemente de la velocidad del flujo, debido a que en porciones aguas abajo donde el diámetro es más grande y, por ende, la velocidad es menor, la llama es más achatada. Claramente esto también es afectado por la inclinación de las paredes del reactor.

Gracias al ángulo de divergencia la temperatura dentro de reactores divergentes, a diferencia de un reactor cilíndrico, no es constante. Si el frente de combustión se halla cerca de la superficie, gracias al mayor área disponible, las pérdidas energéticas con el exterior se acentúan, además el intercambio de calor entre fase gaseosa y fase sólida aumenta. El efecto contrario se da en diámetros menores. Se comprobó tanto experimental como numéricamente que una llama estequiométrica desplazándose aguas arriba incrementa su temperatura en el orden de 80% para el reactor de 15° y un 86% para el de 30° . Dentro del mismo lineamiento, la velocidad del frente de combustión también se ve afectada. Se comprobó la aceleración del frente al avanzar aguas arriba, significando un peligro aumentado de flashback en comparación con el reactor cilíndrico, en donde esta velocidad es constante a lo largo del eje central. Si bien la teoría explica que se debería dar que

la llama desacelera mientras mayor es la velocidad del flujo entrante a la cual se enfrenta, se encontró experimental y numéricamente lo contrario. Una posible explicación tiene que ver nuevamente con el intercambio de calor entre gas y sólido, ya que aguas arriba existirá menos material circundante, por lo cual la transferencia de calor existente puede transferirse aguas arriba de manera más fácil.

La relación de equivalencia tiene el efecto esperado en cuanto a temperatura y velocidad de desplazamiento del frente de combustión que ya se ha visto en literatura. El reactor cilíndrico para la velocidad de 0.35 m/s halló un punto de combustión estacionaria para una relación de equivalencia de 0.6, marcando el punto de inflexión entre desplazamiento aguas arriba y aguas abajo y, por ende, que la llama pueda sumergirse. Para los reactores divergentes, de manera experimental el límite de sumergir la llama fue de 0.8 para el de 15° y 1 para el de 30°, utilizando velocidades de 0.63 m/s y 0.90 m/s, respectivamente. Numéricamente si se pudo sumergir llamas hasta 0.8 para el de 30° y 0.9 para el de 15°, pero esto está influenciado por la manera en que se produce la ignición en el modelo, ya que se precalienta una sección del medio poroso. Por lo que, si se deseara trabajar con mezclas aún más pobres desde la superficie, se debe precalentar el medio.

En cuanto a la estabilización para los reactores divergentes, experimentalmente se tienen 3 puntos de estancamiento para el reactor de 15° y se obtuvieron 2 puntos para el de 30°, con relaciones de equivalencia de [0.4, 0.5, 0.6] y [0.5, 0.6], respectivamente. Los frentes variaron en posición, estando para las llamas más pobres aguas abajo y, en consecuencia, a menor temperatura. Las predicciones numéricas arrojaron 2 llamas estacionarias en el reactor de 30°, de 0.6 y 0.5, dentro de lo cual la llama de 0.6 se desvía de la experimental en cuanto a ubicación, y, por ende, en temperatura, posicionándola en una porción más aguas arriba, sin embargo, la llama de 0.5 se acerca bastante en temperatura y ubicación a la que se encontró en los ensayos. Ambas llamas tienen un tiempo de combustión estacionaria cercano a 30 minutos sin variación. Para el reactor de 15° hubo 2 llamas estacionarias, pero por un tiempo muy corto y muy cercanas entre sí en comparación a los resultados experimentales, para $\varphi = 0.4$ y 0.5, por lo cual no se tienen resultados concluyentes.

La velocidad de filtración tiene un efecto importante dentro de los reactores. Un aumento de esta velocidad significa un alza de temperaturas, debido a que finalmente está ingresando un mayor caudal de combustible, pero además genera que el frente de combustión, con un régimen aguas arriba se desplace más lento y si se tiene un desplazamiento aguas abajo será más rápido, lo cual obviamente en exceso llega a riesgo de blowout o generar que la llama no se sumerja en el medio poroso. Además, esto genera que los puntos de estancamiento de los frentes de combustión se desplacen aguas abajo. Caso contrario y sobre todo en los reactores divergentes, si la velocidad de ingreso es baja, el reactor tendrá dificultad para mantenerse encendido desde la superficie, ya que se tiene una mayor cantidad de medio poroso que necesita ser calentado, lo cual puede llevar a la extinción de la llama. No obstante, un reactor divergente admite velocidades de filtración mayores, incluso, para llama estequiométrica, es decir, el límite superior, en el reactor de 30° la predicción numérica arroja que puede aumentarse hasta 1.6 m/s versus 1 m/s en el reactor cilíndrico y 1.3 m/s en el reactor de 15°.

Finalmente se analizó cómo se comportan los gases producto, con el resultado más importante siendo el tiempo de residencia de los gases producto dentro del reactor. Para el caso analizado, comparando entre el reactor cilíndrico y el de 30° , este tiempo es 18 veces mayor cerca de la salida y 10 veces en medio del reactor. Un tiempo de residencia mayor implica que los reactores divergentes sean ideales para utilizarse en procesos de reformado o de oxidación parcial, permitiendo que se completen las reacciones respecto a la producción del CO y H_2 , por ejemplo, que suelen ser bastante lentas. Además, analizando el número de Reynolds a lo largo del eje central, se puede ver que el régimen de la fase gaseosa es laminar en todo el dominio.

En base a las conclusiones anteriores, se pueden hacer correcciones al diseño de los reactores expuestos. Primeramente, es recomendable utilizar reactores de menor tamaño, debido a la gran cantidad de material sólido necesario para llenarlos, lo cual también abarataría el costo y sería más fácil de utilizar en aplicaciones de acuerdo con el espacio disponible. Debido al peligro inminente de flashback con el desplazamiento aguas arriba acelerado de los reactores divergentes encontrado en este trabajo, tanto experimental como numéricamente, es imperativo contar con una trampa de llama o, si es posible, combinar esta técnica de estabilización con otra, la cual sería utilizar un medio poroso de menor tamaño de poro y, por ende, número de Péclet, con tal de que si la llama no pudo estabilizarse aguas arriba, si pueda hacerlo en el límite entre los dos medios, como lo demuestra Dai et. al [11]. Tomando como referencia los 6 milímetros de diámetro de las esferas utilizadas en este caso, se podría utilizar un medio adicional de 2 mm, con forma cilíndrica. Con esto el diseño ideal de un reactor divergente podría ser el mostrado en la **Figura 5.1 a)** o **b)**, el cual cuenta con una sección cilíndrica agregada con esferas de 2 milímetros en su interior, en comparación con las de 6 milímetros de la sección cónica.

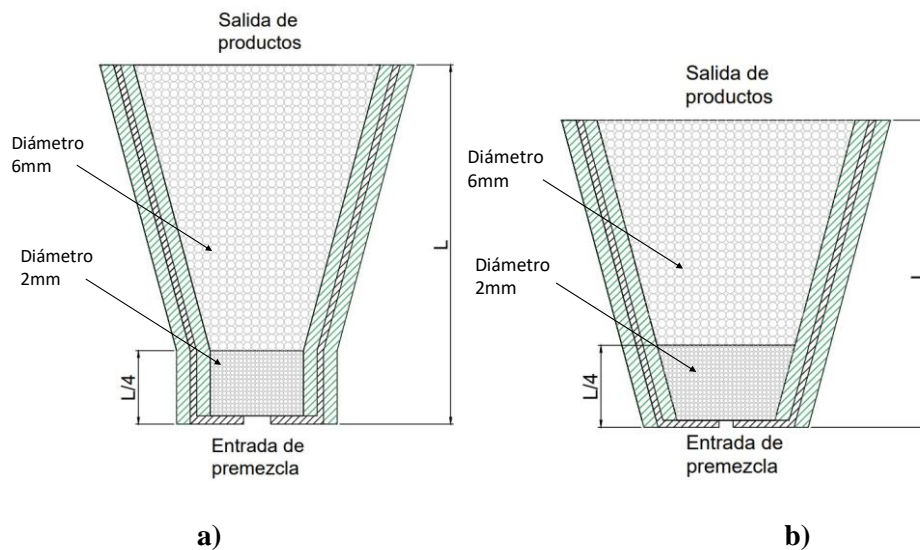


Figura 5.1: **a)** Diseño de reactor divergente con sección cilíndrica llena de esferas de menor tamaño a matriz divergente **b)** Diseño de reactor divergente con sección de esferas de menor tamaño.

En cuanto a mejoras en el diseño del modelo numérico, se podría cambiar el método de cálculo de los campos de velocidades, por ejemplo, resolviendo las ecuaciones de Navier Stokes. Durante el

desarrollo de esta tesis se intentó utilizar un modelo con Navier Stokes, resolviendo con el método de Chorin Temam, no obstante, representaba un costo computacional altísimo y, por otro lado, tal método interpreta la densidad y viscosidad del fluido como constante y es muy sensible a cambios en estas propiedades, por lo cual no tiene la capacidad de reproducir los fenómenos térmicos correspondientes, que son cruciales para el cálculo de la combustión numérica. Es por esto que finalmente se optó por resolver el campo de velocidades con el método de las líneas de corriente, el cual entrega un costo computacional menor y predice bastante acertadamente el comportamiento real de los campos de velocidad. Sin embargo, en cuanto a las velocidades de los frentes de combustión existen falencias. Finalmente, una futura investigación con este tipo de reactores podría ser un modelo numérico adicionando un esquema de más cantidad de pasos en la cinética química, con tal de predecir las emisiones nocivas de una combustión rica, incompleta o super adiabática, así como intentar corroborar la capacidad de producir hidrógeno con llamas estacionarias.

Referencias

- [1] EPA (USA), Nitrogen oxides (NO_x), why and how they are controlled, Epa-456/F-99-006R. (1999) 48.
- [2] Y.B. Zeldovich, The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions, *Acta Physicochim. U.S.S.R.* 21 (1946) 577–628.
- [3] M.A. Mujeebu, M.Z. Abdullah, M.Z.A. Bakar, A.A. Mohamad, R.M.N. Muhad, M.K. Abdullah, Combustion in porous media and its applications - A comprehensive survey, *J. Environ. Manage.* 90 (2009) 2287–2312. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2008.10.009>.
- [4] S.S. Rashwan, M.A. Nemitallah, M.A. Habib, Review on Premixed Combustion Technology: Stability, Emission Control, Applications, and Numerical Case Study, *Energy and Fuels.* 30 (2016) 9981–10014. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.6b02386>.
- [5] M.A. Mujeebu, M.Z. Abdullah, M.Z.A. Bakar, A.A. Mohamad, M.K. Abdullah, Applications of porous media combustion technology - A review, *Appl. Energy.* 86 (2009) 1365–1375. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2009.01.017>.
- [6] S. Voss, Porous Media Combustion, *Handb. Combust.* 5 (2016) 1–17. <https://doi.org/10.1002/9783527628148.hoc106>.
- [7] A. Bakry, A. Al-Salaymeh, A.H. Al-Muhtaseb, A. Abu-Jrai, D. Trimis, Adiabatic premixed combustion in a gaseous fuel porous inert media under high pressure and temperature: Novel flame stabilization technique, *Fuel.* 90 (2011) 647–658. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.09.050>.
- [8] S.M. Hashemi, S.A. Hashemi, Numerical investigation of the flame stabilization in a divergent porous media burner, *Proc. Inst. Mech. Eng. Part A J. Power Energy.* 231 (2017) 173–181. <https://doi.org/10.1177/0957650916685912>.
- [9] B. Lin, H. Dai, C. Wang, Q. Li, K. Wang, Y. Zheng, Combustion characteristics of low concentration coal mine methane in divergent porous media burner, *Int. J. Min. Sci. Technol.* 24 (2014) 671–676. <https://doi.org/10.1016/j.ijmst.2014.03.027>.
- [10] P. Qian, M. Liu, X. Li, F. Xie, Z. Huang, C. Luo, X. Zhu, Combustion characteristics and radiation performance of premixed hydrogen/air combustion in a mesoscale divergent porous media combustor, *Int. J. Hydrogen Energy.* 45 (2020) 5002–5013. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.094>.
- [11] H. Dai, H. Zhu, H. Dai, Z. Song, Z. Wang, S. He, X. Wang, Syngas production by methane-rich combustion in a divergent burner of porous media, *Int. J. Hydrogen Energy.* (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.160>.
- [12] S.R. Turns, *An Introduction To Combustion*, Second edi, McGraw-Hill, 2000.

- [13] H. Gonzalez, S. Caro, M. Toledo, H. Olguin, Syngas production from polyethylene and biogas in porous media combustion, *Int. J. Hydrogen Energy*. 43 (2018) 4294–4304. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.01.050>.
- [14] M.M. Kamal, A.A. Mohamad, Combustion in porous media, *Proc. Inst. Mech. Eng. Part A J. Power Energy*. 220 (2006) 487–508. <https://doi.org/10.1243/09576509JPE169>.
- [15] F.J. Weinberg, Combustion temperatures: The future?, *Nature*. 233 (1971) 239–241. <https://doi.org/10.1038/233239a0>.
- [16] A.J. Barra, J.L. Ellzey, Heat recirculation and heat transfer in porous burners, *Combust. Flame*. 137 (2004) 230–241. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.02.007>.
- [17] I. Malico, M.A. Mujeebu, Potential of Porous Media Combustion Technology for Household Applications, *Int. J. Adv. Thermofluid Res.* 1 (2018) 45–62. <https://doi.org/10.51141/ijatr.2015.1.4>.
- [18] G.S. Sinha, P. Muthukumar, Material characterization role in porous media combustion stability and performance, *Mater. Today Proc.* 18 (2019) 5063–5068. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.07.501>.
- [19] M. Sheffer, P. Colombo, Cellular Ceramics: Structure Manufacturing, Properties and Applications, in: *Cell. Ceram. Struct. Manuf. Prop. Appl.*, 2005: pp. 484–508.
- [20] A.M. Ramírez, F.J.E. Beltrán, J.M. Yáñez-Limón, Y. V. Vorobiev, J. González-Hernández, J.M. Hallen, Effects of porosity on the thermal properties of a 380-aluminum alloy, *J. Mater. Res.* 14 (1999) 3901–3906. <https://doi.org/10.1557/JMR.1999.0528>.
- [21] C. Bedoya, *Stationary Flames Within Porous Media*, Karlsruhe Institut für Technologie, 2016.
- [22] D.T. K. Wawrzinek, Flame Stabilization of Highly Diffusive Gas Mixtures in Porous Inert Media, in: R.S. J. Vad, T. Lajos (Ed.), *Model. Fluid Flow*, 1st ed., Springer, 2004: pp. 107–121. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-08797-8>.
- [23] A. Mohammadi, A. Jazayeri, Numerical Simulation of Combustion in Porous Media, in: *Numer. Simul. - From Theory to Ind.*, 2012: pp. 529–556. <https://doi.org/10.5772/50386>.
- [24] R. Amirante, E. Distaso, P. Tamburrano, R.D. Reitz, Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations, *Int. J. Engine Res.* 18 (2017) 951–970. <https://doi.org/10.1177/1468087417720018>.
- [25] A.H. Saleh, A.M., Chaichan, M.T., Naser, Study of the Effect of Elevated Temperatures on the Laminar Burning Velocity of Propane-Air Mixtures, 2nd Sci. Conf. Eng. Sci. Diyala, Iraq. (2015).
- [26] T.C. Lieuwen, Flame Stabilization, Flashback, Flameholding, and Blowoff, in: *Unsteady*

Combustor Phys., Cambridge University Press, 2012: pp. 293–316.
<https://doi.org/10.1017/CBO9781139059961.012>.

- [27] Y. Wu, Flame Lift-Off and Blow-Out Stability Limits and Their Application in Gas Burners, in: A.K.A. Maximilian Lackner, Franz Winter (Ed.), *Handb. Combust. Vol. 3 Gaseous Liq. Fuels*, 2010: pp. 121–140. <https://doi.org/10.1002/9783527628148.hoc044>.
- [28] N.J. Moore, J.L. McCraw, K.M. Lyons, Observations on Jet-Flame Blowout, *Int. J. React. Syst.* 2008 (2008) 1–7. <https://doi.org/10.1155/2008/461059>.
- [29] N.C. Ismail, M.Z. Abdullah, K.F. Mustafa, N.M. Mazlan, P. Gunnasegaran, A.P. Irawan, Double-layer micro porous media burner from lean to rich fuel mixture: Analysis of entropy generation and exergy efficiency, *Entropy*. 23 (2021). <https://doi.org/10.3390/e23121663>.
- [30] M.Z. Xie, J.R. Shi, Y.B. Deng, H. Liu, L. Zhou, Y.N. Xu, Experimental and numerical investigation on performance of a porous medium burner with reciprocating flow, *Fuel*. 88 (2009) 206–213. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2008.07.020>.
- [31] Y. Wu, V. Modica, B. Rossow, F. Grisch, Effects of pressure and preheating temperature on the laminar flame speed of methane/air and acetone/air mixtures, *Fuel*. 185 (2016) 577–588. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.07.110>.
- [32] A. Bakry, A. Al-Salaymeh, A.H. Al-Muhtaseb, A. Abu-Jrai, D. Trimis, CO and NOx emissions in porous inert media (PIM) burner system operated under elevated pressure and inlet temperature using a new flame stabilization technique, *Chem. Eng. J.* 165 (2010) 589–596. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.09.077>.
- [33] S. Voss, M.A.A. Mendes, J.M.C. Pereira, S. Ray, J.C.F. Pereira, D. Trimis, Investigation on the thermal flame thickness for lean premixed combustion of low calorific H₂/CO mixtures within porous inert media, *Proc. Combust. Inst.* 34 (2013) 3335–3342. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.06.044>.
- [34] A. Loukou, I. Frenzel, J. Klein, D. Trimis, Experimental study of hydrogen production and soot particulate matter emissions from methane rich-combustion in inert porous media, *Int. J. Hydrogen Energy*. 37 (2012) 16686–16696. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.02.041>.
- [35] Z. Al-Hamamre, S. Voß, D. Trimis, Hydrogen production by thermal partial oxidation of hydrocarbon fuels in porous media based reformer, *Int. J. Hydrogen Energy*. 34 (2009) 827–832. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.10.085>.
- [36] P. B., Numerical Simulation of Devolatilization and Combustion of Waste Material in Packed Beds, (1994).
- [37] H.B. Gao, S.C. Zong, X.B. Feng, C.W. Zhang, Two-Dimensional Numerical Study of Methane-Air Combustion Within Catalytic and Non-catalytic Porous Medium, *Front. Chem.* 8 (2020) 1–15. <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.511792>.
- [38] V. Bubnovich, M. Toledo, Analytical modelling of filtration combustion in inert porous

media, Appl. Therm. Eng. 27 (2007) 1144–1149.
<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2006.02.037>.

- [39] W.D. KINGERY, J. FRANCL, R.L. COBLE, T. VASILOS, Thermal Conductivity: X, Data for Several Pure Oxide Materials Corrected to Zero Porosity, *J. Am. Ceram. Soc.* 37 (1954) 107–110. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.1954.tb20109.x>.
- [40] M. Fierro, C. Gutierrez, V. Bubnovich, N. Ripoll, M. Toledo, Thermal effect of hollow spheres in a filtration combustion process, *Appl. Therm. Eng.* 195 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.117037>.
- [41] D.L. McElroy, F.J. Weaver, M. Shapiro, A.W. Longest, D.W. Yarbrough, The Thermal Conductivity of Beds of Spheres, *Therm. Conduct.* 20. (1989) 423–433. https://doi.org/10.1007/978-1-4613-0761-7_40.
- [42] M. Elsari, R. Hughes, Axial effective thermal conductivities of packed beds, *Appl. Therm. Eng.* 22 (2002) 1969–1980. [https://doi.org/10.1016/S1359-4311\(02\)00117-5](https://doi.org/10.1016/S1359-4311(02)00117-5).
- [43] K. V. Dobrego, I.M. Kozlov, V.I. Bubnovich, C.E. Rosas, Dynamics of filtration combustion front perturbation in the tubular porous media burner, *Int. J. Heat Mass Transf.* 46 (2003) 3279–3289. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(03\)00125-X](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(03)00125-X).
- [44] F. Pereira, A. Oliveira, Analytical Study of the Excess Enthalpy in the Combustion Within Porous Media, in: *Proc. 10o Brazilian Congr. Therm. Sci. Eng. -- ENCIT 2004*, 2004.
- [45] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames, *Combust. Sci. Technol.* 27 (1981) 31–43. <https://doi.org/10.1080/00102208108946970>.
- [46] K.M. Moiseeva, A. Yu Krainov, D.A. Krainov, Numerical investigation on burning rate of propane-air mixture, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 696 (2019) 0–4. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/696/1/012011>.
- [47] E. Fernández-Tarrazo, A.L. Sánchez, A. Liñán, F.A. Williams, A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion, *Combust. Flame.* 147 (2006) 32–38. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2006.08.001>.
- [48] D. Garrido-López, S. Sarkar, Effects of imperfect premixing coupled with hydrodynamic instability on flame propagation, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 621–628. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.07.014>.
- [49] T. Poinso, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd Editio, Edwards, 2005.
- [50] H. Liu, S. Dong, B.W. Li, H.G. Chen, Parametric investigations of premixed methane-air combustion in two-section porous media by numerical simulation, *Fuel.* 89 (2010) 1736–1742. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.06.001>.

- [51] N.O. Moraga, C.E. Rosas, V.I. Bubnovich, N.A. Solari, On predicting two-dimensional heat transfer in a cylindrical porous media combustor, *Int. J. Heat Mass Transf.* 51 (2008) 302–311. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.03.041>.
- [52] C. Zheng, L. Cheng, A. Saveliev, Z. Luo, K. Cen, Gas and solid phase temperature measurements of porous media combustion, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 3301–3308. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.05.037>.
- [53] H. Dai, H. Dai, Efficient lean combustion in a novel porous medium burner with the integrated of pellets and ceramic foam: Experimental study of flame propagation and stability, *Combust. Flame.* 244 (2022) 112244. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.112244>.
- [54] H. Gao, Z. Qu, X. Feng, W. Tao, Combustion of methane/air mixtures in a two-layer porous burner: A comparison of alumina foams, beads, and honeycombs, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 52 (2014) 215–220. <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2013.09.013>.
- [55] I. Malico, X.Y. Zhou, J.C.F. Pereira, Two-dimensional numerical study of combustion and pollutants formation in porous burners, *Combust. Sci. Technol.* 152 (2000) 57–79. <https://doi.org/10.1080/00102200008952127>.
- [56] B.A. Albrecht, J.B.W. Kok, N. Dijkstra, T. Van Der Meer, Prediction and measurement of the product gas composition of the ultra rich premixed combustion of natural gas: Effects of equivalence ratio, residence time, pressure, and oxygen concentration, *Combust. Sci. Technol.* 181 (2009) 433–456. <https://doi.org/10.1080/00102200802612351>.
- [57] B.D. Wood, X. He, S. V Apte, Modeling Turbulent Flows in Porous Media, *Annu. Rev. Od Fluid Mech.* 52 (2020) 171–203. <https://doi.org/https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-010719-060317>.

Apéndice A

A.1 Método ADI

El modelo numérico a utilizar para la resolución de las ecuaciones gobernantes del problema corresponde al método ADI. El método ADI es de tipo fraccionado y es utilizado para resolver ecuaciones diferenciales parciales, por lo general parabólicas, en 2D o 3D, que divide en tantos pasos temporales intermedios como dimensiones tenga el problema.

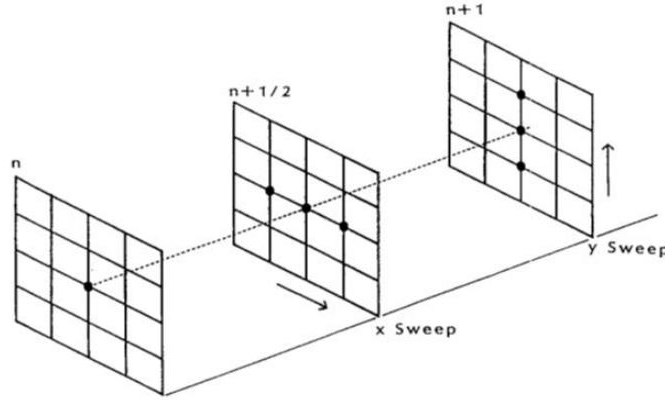


Figura A 1: Ilustración de la metodología ADI.

En cada paso temporal fraccionado, se recorren las ecuaciones discretizadas en una dirección específica, en el caso 2D, por ejemplo, primeramente, se resuelve el esquema haciendo barrido en dirección x , llevando tal información al paso $n + 1/2$, para luego, en el paso $n + 1$, resolver el esquema discretizado con la información del paso anterior, en dirección y . Al ser un método de formulación implícita, se genera un sistema matricial tridiagonal, el cual puede ser resuelto rápidamente con el algoritmo de Thomas. Tomando como ejemplo la ecuación de difusión en 2D y para exponer el sistema que se utilizará para resolver, se tiene:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) \quad (\text{A.1})$$

Llevando al tiempo $n + \frac{1}{2}$ el barrido en eje x :

$$\frac{\left(\varphi_{(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} - \varphi_{(i,j)}^n \right)}{\left(\frac{\Delta t}{2} \right)} = \alpha \left(\frac{\left(\varphi_{(i+1,j)}^{n+\frac{1}{2}} - 2\varphi_{(i,j)}^{n+\frac{1}{2}} + \varphi_{(i-1,j)}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta x^2} + \frac{\left(\varphi_{(i,j+1)}^n - 2\varphi_{(i,j)}^n + \varphi_{(i,j-1)}^n \right)}{\Delta y^2} \right) \quad (\text{A.2})$$

Los valores iniciales de α y β son condicionados por las condiciones de borde del dominio y con ellos, mediante las ecuaciones **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** y **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se pueden calcular todos los valores. Luego, para encontrar los valores de φ se aplica sustitución hacia atrás (paso final del algoritmo).

El mismo procedimiento se replica para el barrido en y y actualizando al tiempo $n + 1$.