Simulación numérica de la distribución de temperaturas y flujo de aire en el horno de una cocina de uso doméstico

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA SALESIANA

SEDE CUENCA

UNIDAD DE POSGRADOS

MAESTRÍA EN MÉTODOS NUMÉRICOS PARA DISEÑO EN INGENIERÍA

Tema: Simulación numérica de la distribución de temperaturas y flujo de aire en el horno de una cocina de uso doméstico

Tesis previa a la obtención del Grado de:

"Magíster en Métodos Numéricos para Diseño en Ingeniería"

Autor: Ing. Olena Neira

Director: MSc. Ing. Paúl Álvarez



Cuenca, 1 de junio del 2011

Datos de catalogación bibliográfica

OLENA NEIRA RODAS

Simulación numérica de la distribución de temperaturas y flujo de aire en el horno de una cocina de uso doméstico.

Universidad Politécnica Salesiana Cuenca-Ecuador, 2011

DEPERTAMENTO DE POSGRADO Formato 170x240 Páginas 104

Breve reseña del autor e información de contacto



Olena Neira Rodas Ingeniero Mecánico Egresada de la Maestria en Métodos Numéricos para Diseño en Ingeniería Unidad de Posgrados Universidad Politécnica Salesiana oneira@ups.edu.ec

Dirigido por:

Paúl Alvarez Lloret Ingeniero Mecánico Master en Métodos Numéricos Docente de la Universidad Politécnica Salesiana ealvarez@ups.edu.ec

Todos los derechos reservados.

Queda prohibida, salvo excepción prevista en la Ley, cualquier forma de reproducción, distribución, comunicación pública y transformación de esta obra para fines comerciales, sin contar con autorización de los titulares de propiedad intelectual. La infracción de los derechos mencionados puede ser constitutiva de delito contra la propiedad intelectual. Se permite la libre difusión de este texto con fines académicos o investigativos por cualquier medio, con la debida notificación a los autores.

DERECHOS RESERVADOS

© 2011 Universidad Politécnica Salesiana. Cuenca-Ecuador-Sudamérica

OLENA NEIRA RODAS

Simulación numérica de la distribución de temperaturas y flujo de aire en el horno de una cocina de uso doméstico.

IMPRESO EN ECUADOR - PRINTED IN ECUADOR

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN	9		
1.1. Las técnicas numéricas en Ingeniería	9		
1.2. Antecedentes	10		
1.3. Justificación			
CAPÍTULO II. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	14		
2.1. Problemas existentes en los hornos de cocinas de uso doméstico	14		
2.2. Necesidad de solución numérica	14		
2.3. Descripción del sistema analizado	15		
2.4. Identificación del dominio	18		
2.5. Selección de software	19		
CAPÍTULO III. PREPROCESO			
3.1 Introducción			
3.2 Creación de una geometría tridimensional			
3.3 Discretización espacial	25		
3 4 Desarrollo del modelo matemático	33		
3.4.1. Introducción			
3.4.2. Ecuaciones de conservación	33		
3.4.3. Modelo de turbulencia	50		
3.4.4. Las ecuaciones de conservación de especies	61		
3.4.5. Modelo de combustión	65		
3.4.6. Modelo de radiación			
3.5. Condiciones iniciales y condiciones de contorno	74		
CAPÍTULO IV. RESOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES DE GOBIE	RNO .		
	79		
4.1. Método de solución	79		
4.1.1. Método de las diferencias finitas	80		
4.1.2. Método de los elementos finitos	81		
4.1.3 Método de los volúmenes finitos	82		
CAPÍTULO V. POST-PROCESO	85		
5.1. Análisis de resultados de simulaciones	85		
5.2. Validación de resultados	92		

CAPÍTULO VI. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	
6.1. Conclusiones	
6.2. Recomendaciones	101
BIBLIOGRAFÍA	103

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Esquema de funcionamiento del horno de la cocina de uso doméstico	. 16
Figura 2. Quemador del horno de la cocina de uso doméstico	17
Figura 3 a. Cocina completa	. 22
Figura 3 b. Volumen ocupado por el fluido en diferentes zonas de la cocina	22
Figura 3 c. Quemador	. 22
Figura 3 d. Calientaplatos	22
Figura 3 e. Horno	23
Figura 4. División del dominio en subdominios	23
Figura 5. Elementos usados para mallar geometrías bidimensionales	. 24
Figura 6. Elementos usados para mallar geometrías tridimensionales	24
Figura 7. Ejemplo de mallado body-fitted	25
Figura 8. Ejemplo de mallado en coordenadas cartesianas	. 25
Figura 9. Mallas con nodos centrados en los elementos y centrados en los vértices	. 26
Figura 10 a,b,c. Quemador mallado	30
Figura 11 a, b, c. Calientaplatos mallado	31
Figura 12 a,b. Horno mallado	32
Figura 13. Flujo másico que entra y sale de un elemento fluido	. 34
Figura 14. Esfuerzos superficiales sobre las caras de un elemento fluido	37
Figura 15. (a), (b). Esfuerzos normales y tangenciales actuando sobre un elemento	
fluido	39
Figura 16. Vectores de calor de un elemento fluido	44
Figura 17. Discretización de variables	80
Figura 18 a), b), c): Campo de velocidad de flujo de mezcla butano-aire primario	
dentro del quemador	. 86
Figura 19. El rango de velocidad del flujo dentro del quemador	87
Figura 20. La forma de las llamas. a). Resultado de la simulación. b). La imagen real	
	. 87
Figura 21. Distribución de la temperatura en la bandeja	88
Figura 22. Distribución de la temperatura: a) y b) en el interior del calientaplatos en	l
los planos paralelos a la bandeja c) en la bandeja, obtenida experimentalmente	89

Figura 23. El rango de velocidad y temperatura en calientaplatos 89
Figura 24. El campo de velocidad en el calientaplados: a) en los orificios de salida;
b) y c) en los planos transversal y longitudinal del calientaplatos en los planos para-
lelos a la bandeja
Figura 25. Distribución de la temperatura en el interior del horno en los planos para-
lelos a la bandeja
Figura 26. Flujo de gases de combustión en el horno
Figura 27. Rango de temperatura en el horno
Figura 28. Fuentes de error en los cálculos CFD
Figura 29. La posición de termocuplas utilizada para medir la temperatura dentro
del horno

ÍNDICE DE TABLAS Y GRÁFICAS

Tabla 1. Parámetros seleccionados para el mallado del quemador	29
Tabla 2. Parámetros seleccionados para el mallado del calientaplatos	29
Tabla 3. Parámetros seleccionados para el mallado del horno	30
Tabla 4. Datos informativos de la malla del quemador	31
Tabla 5. Datos informativos de la malla del calientaplatos	32
Tabla 6. Datos informativos de la malla del horno	32
Tabla 7. Ecuaciones de conservación	49
Tabla 8. Ecuaciones promediadas de Navier-Stokes, RANS	54
Tabla 9. Coeficientes constantes. Modelo k-ε	60
Tabla 10. Comparación de los modelos de radiación	72
Tabla 11. Resumen de los modelos empleados en las simulaciones	74
Tabla 12. Tipos clásicos de condiciones frontera, que se presentan en los problemas	
de fenómenos de transporte	75
Tabla 13. Los valores de la temperatura el los puntos indicados en la figura 28, ob-	
tenida experimentalmente y mediante la simulación	96
Gráfica 1. La velocidad de salida de la mezcla butano-aire primario en los centros	
de los agujeros del quemador en la parte frontal y posterior	86
Gráfica 2. La velocidad de salida de los gases de combustión en los centros de los	
agujeros de la bandeja en la parte izquierda y derecha	90
Gráfica 3 a) y b). Comparación de la temperatura de los gases de combustión me-	
dida en los puntos indicados en la figura del horno y obtenida mediante la simula-	
ción	97

CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN

1.1. Las técnicas numéricas en Ingeniería [8]

Las técnicas numéricas en Ingeniería han experimentado un gran desarrollo en las últimas décadas. De esta tendencia no se ha apartado una rama tan característica de la Ingeniería Mecánica como es la Mecánica de Fluidos.

La dinámica de fluidos computacional (o CFD, acrónimo de las palabras inglesas "Computational Fluid Dynamics") consiste en el análisis del movimiento de los fluidos mediante simulaciones con ordenadores. Su objetivo es la búsqueda de una solución aproximada de las ecuaciones que gobiernan el movimiento de los fluidos, discretizando o dividiendo el dominio de cálculo en pequeños elementos y resolviendo allí dichas ecuaciones.

Los métodos numéricos aplicados a la Mecánica de Fluidos resultan una herramienta muy útil para el diseño y análisis de las distintas situaciones prácticas en las que se utilizan los fluidos.

Hoy en día, con las enormes posibilidades de los ordenadores y los desarrollos de los métodos numéricos, la CFD se está convirtiendo en una herramienta muy práctica y eficiente para el análisis de fluidos.

La CFD puede ser muy útil en un amplio espectro de industrias y representa una poderosa ayuda para el ingeniero de diseño, de producción e incluso de mantenimiento. Se está utilizando en sectores tan variados como la industria química, aeroespacial, metalúrgica, eléctrica, etc. Es también ampliamente utilizada en el estudio para predecir el movimiento de aire y el confort (sistemas de ventilación), así como para analizar fenómenos termofluídicos en el medio ambiente, como dispersión de contaminantes en la atmósfera o de vertidos en los ríos, etc. Básicamente son tres los tipos de problemas que se pueden resolver:

• Simulación de un equipo existente, con el fin de evaluar cambios en su operación o en su diseño (ahorros de energía, mejoras en la calidad del producto, mejoras medioambientales), o para diagnosticar problemas operacionales.

• Mejoras en el diseño de equipos, pudiéndose evaluar un amplio abanico de opciones de diseño, incrementándose así las posibilidades para la innovación tecnológica.

• Simulación de procesos, con o sin transiciones de fase, interacciones sólidofluido, fluido-medio poroso.

El software existente de Dinámica de Fluidos Computacional puede ser utilizado para la simulación numérica de los procesos de flujo de fluidos, mezclado, combustión, transporte de calor y masa, etc.

Las principales aplicaciones de la CFD en equipos y sistemas son:

• Diagnósticos con predicción de flujos de calor, campos de velocidades y temperaturas en conductos de gases, tuberías de líquidos, cambiadores de calor, etc.

• Diagnósticos con predicción de flujos de calor, campos de velocidades y temperaturas en cámaras de combustión, calderas, hornos, etc.

• Análisis de flujos en ciclones, separadores, etc.

• Diseño de componentes de plantas de tratamiento de aguas residuales y aguas limpias.

• Diseño de quemadores en general, quemadores de bajo NOx, válvulas y otros equipos auxiliares.

1.2. Antecedentes

Hasta finales de los años 60 los ordenadores no alcanzaron velocidades de cálculo suficientes como para resolver casos sencillos. Hasta entonces, las técnicas experimentales constituían prácticamente la única herramienta de análisis y diseño de cualquier problema de Mecánica de Fluidos.

En la actualidad, los ensayos experimentales siguen siendo necesarios para la comprobación de las prestaciones de diseños complejos, pero los continuos avances en la capacidad de los ordenadores y en los algoritmos permiten una reducción importante en el número de ensayos necesarios. Así, por ejemplo, el diseño típico de un modelo de ala de avión, exige en la actualidad 3 o 4 ensayos en túnel aerodinámico, en lugar de los 10 o 15 que eran necesarios anteriormente. En realidad, la palabra que mejor definiría hoy la relación entre ambas herramientas podría ser la de complementariedad.

A lo largo de los últimos veinte años las técnicas de CFD han evolucionado mejorando los programas comerciales e introduciéndose en las distintas áreas de la ingeniería hasta obtener un merecido lugar dentro de las necesidades reales de la industria. Dichos programas se vienen usando de manera creciente de manera paralela a la mejora de los sistemas informáticos que les sirven de soporte.

Desde su inicial concepción, orientada a la industria aeroespacial, la técnicas numéricas se han extendido a un número creciente de aplicaciones dentro de un amplio espectro de industrias, desde las más clásicas como la automovilística o electrónica, hasta las nuevas aplicaciones en industrias alimentarias y biomédicas. Sin embargo, aún no se emplean las técnicas numéricas como auténticas herramientas de diseño. En realidad, se obtendrán los mayores beneficios cuando se llegue a un nivel de utilización en el día a día del diseño industrial, es decir, cuando su difusión sea tal que puedan llegar a ser utilizadas por ingenieros sin demasiada especialización en estas técnicas y no estar restringida su utilización a los expertos en la materia.

1.3. Justificación

El uso de prototipos para el diseño de productos es mucho más costoso que la construcción de modelos computacionales. Por otro lado, el control que se tiene sobre los experimentos virtuales es mucho mayor que el que se tiene sobre los experimentos reales. Además, la cantidad de información que se obtiene de las simulaciones permite entender con mayor detalle los procesos que se desarrollan durante el funcionamiento de un producto industrial.

El conocimiento de los procesos térmicos que se desarrollan en los hornos de las cocinas se vuelve indispensable para la toma de decisiones inteligentes sobre ciertos parámetros que regulan su funcionamiento. El uso de prototipos y de experimentos, aunque siempre es deseable en alguna medida, no responde a las necesidades modernas de eficiencia y precisión. Por esta razón, Los procesos térmicos están caracterizados por la distribución de temperaturas y los correspondientes flujos de calor que se producen en el transcurso del tiempo. La determinación de dicha distribución exige la resolución de un problema de valores iniciales y de contorno (PVIC), gobernado por ecuaciones en derivadas parciales. Estas ecuaciones provienen del balance de energía en el medio estudiado. En la formulación del modelo matemático se pueden considerar diversos efectos de transmisión del calor: conducción, convección, radiación.

La resolución del PVIC se realizará mediante el uso de métodos numéricos, esto es, se transformará el modelo matemático en un modelo numérico mediante un proceso de discretización. La discretización en el espacio se realizará mediante el método de los volúmenes finitos y la discretización en el tiempo mediante diferencias finitas. Vale indicar que en este proyecto se recurrirá a códigos comerciales que tienen ya implementados los modelos numéricos descritos.

Las ventajas que proporciona el análisis con técnicas CFD se pueden resumir en las siguientes:

• Reducción sustancial de tiempos y de costes en los nuevos diseños.

• Posibilidad de analizar sistemas y condiciones muy difíciles de simular experimentalmente: velocidades supersónicas, temperaturas extremas y elementos en movimiento relativo.

• Capacidad de estudiar sistemas bajo condiciones peligrosas o más allá de sus condiciones límite de funcionamiento, por ejemplo, accidentes con sustancias tóxicas.

• Nivel de detalle prácticamente ilimitado. Los métodos experimentales son tanto más caros cuanto mayor es el número de puntos de medida, mientras que los programas CFD pueden generar un gran volumen de resultados sin coste añadido, y con posibilidad hacer estudios paramétricos.

• Un valor añadido es poder poner en el producto la etiqueta de "Diseñado con ayuda del ordenador", y la facilidad para generar gráficos fácilmente interpretables, que estimulan la "compra" del producto (lo cual, por otro lado, constituye un riesgo).

Aunque se razone que se abaratan los costes respecto a las técnicas experimentales, las técnicas CFD no son gratuitas. En primer lugar, son necesarias máquinas de gran capacidad de cálculo (los usuarios de técnicas CFD trabajan habitualmente con los ordenadores más potentes que existen), y un software con precio todavía no accesible al gran público. En segundo lugar, se necesita personal cualificado que sea capaz de dominar los programas y, sobre todo, analizar adecuadamente los resultados.

Los desarrollos en el campo de las técnicas numéricas dedicadas al estudio de flujos se están acercando cada vez más a los de otras herramientas de CAE como las de análisis de esfuerzos en sólidos y estructuras. Su retraso se debe a la gran complejidad de las ecuaciones y, sobre todo, a la dificultad de modelar adecuadamente ciertos fenómenos como la turbulencia, los flujos multifásicos y la combustión.

Uno de los mayores inconvenientes de las técnicas CFD consiste en que no siempre es posible llegar a obtener resultados suficientemente precisos y siempre está presente la posibilidad de cometer graves errores en cuestiones básicas. Esto proviene de:

• Simplificar el fenómeno que será estudiado para que el hardware y software sean capaces de abordarlo. El resultado será tanto más preciso cuanto más adecuadas hayan sido las hipótesis y las simplificaciones realizadas.

• La existencia de insuficientes e incompletos modelos para la simular el efecto de la turbulencia, los flujos multifásicos o la combustión, entre otros.

• La tendencia humana de aceptar sin mayores reservas todo lo que se ha obtenido utilizando un ordenador, sobre todo cuando se presentan los resultados en forma atractiva.

CAPÍTULO II PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

2.1. Problemas existentes en los hornos de cocinas de uso doméstico

En las cocinas de uso doméstico en la actualidad existe el problema de irregularidad de distribución de temperaturas dentro de los hornos, lo que afecta la calidad de los productos preparados en ellos, sobre todo productos de pastelería. Este problema en algunos hornos se soluciona con el uso de un ventilador, pero esta solución se refleja en los costos de las cocinas, aumento considerable del tiempo de cocción y consumo de gas.

Las causas de este comportamiento son desconocidas y los fabricantes de las cocinas intentan solucionar estos problemas mediante cambios en la geometría del horno y del quemador o cambiando los parámetros de funcionamiento como por ejemplo el caudal del gas y del aire primario. Pero este procedimiento es largo y muy costoso y hasta el momento no se ha logrado solucionar el problema.

2.2. Necesidad de solución numérica

El diseño de sistemas de combustión y de control de contaminantes tradicionalmente se ha basado en métodos empíricos: experiencia y experimentación práctica. Los modelos físicos y matemáticos que se han usado han sido de un rango de aplicación limitado y de formulación básica. El tema ha sido tratado fundamentalmente desde el punto de vista tecnológico, donde la cuestión principal es el procedimiento técnico o "cómo hacerlo".

Paralelamente, ha habido un lento desarrollo de la ciencia de la combustión, y algún progreso en contestar los "por qué" más que los "cómo". Recién en los últimos años se ha producido un progreso significativo con el desarrollo de descripciones matemáticas más completas como modelos de fenómenos de combustión. Estos modelos ya permiten el análisis detallado del flujo, la transferencia de calor y la distribución espacial de las velocidades de reacción dentro de un sistema, aunque aún no son lo suficientemente versátiles, ni han sido validados experimentalmente a un grado suficiente, como para permitir a un ingeniero especialista en combustión que los utilice para optimizar un combustor o planta de quemado sin recurrir a datos experimentales, fórmulas empíricas o experiencia previa. Sin embargo, estos modelos resultan muy útiles en la etapa de diseño, pues permiten analizar rápida y económicamente la influencia de los cambios en la geometría, las condiciones de entrada, etc, en forma paramétrica.

Los métodos tradicionales utilizados para un diseño de hornos aumenta considerablemente el tiempo necesario para mejorar su calidad y los costos de los mismos. La aplicación de métodos numéricos para el diseño permitirá soluciones optimas en tiempos mas cortos y con costos mas bajos.

A diferencia de los métodos experimentales CFD proporciona datos de presión velocidad, densidad, temperatura y otros valores de interés en todos los puntos del dominio de flujo simulado. Todo ello hace que el modelado matemático del funcionamiento del horno resulte una herramienta muy interesante en el diseño o rediseño de procesos.

2.3. Descripción del sistema analizado.

Para el análisis se escogió la cocina a gas de uso doméstico de marca Indurama modelo Avant 32.

Construcción y funcionamiento del horno de la cocina.

El horno de la cocina de uso doméstico consta de dos compartimientos (figura 1): la parte inferior es la cámara de combustión, llamada "calientaplatos", donde se realiza el proceso de combustión, y la parte superior, llamada "horno", donde se realiza la preparación de los alimentos. Las dos partes están separadas por una bandeja con orificios por los cuales los gases calientes pasan del calientaplatos al horno.



Figura 1. Esquema de funcionamiento del horno de la cocina de uso doméstico.

Dentro del calientaplatos está ubicado el quemador atmosférico, llamado "quemador Bunsen". El quemador (figura 2) se compone del inyector de gas 1, en el cual en función de la presión de la línea de combustible y de la configuración del agujero de salida, induce el combustible y aire primario en un vénturi (formado por el cono 2, cuello 3 y difusor 4), seguido de la cabeza 5 donde la mezcla reactiva es distribuida a los pequeños agujeros de salida, en los cuales las llamas son estabilizadas.

El proceso de inducción de aire primario acontece debido a la acción combinada de efectos difusivos y advectivos ejercidos por el combustible que sale del inyector a presión en el aire en torno a él. Estos efectos fluido-dinámicos dependen de las condiciones de presión, densidad del combustible y geometría del inyector y del vénturi. La estrangulación del fluido a su paso por el vénturi genera una caída de presión axial, induciendo aire al interior del guemador. Un segundo efecto de estrangulación en la garganta 3 del vénturi es la homogeneización espacial de la estequiometría de la mezcla reactiva en función de los valores de velocidad y turbulencia alcanzados. Después de la garganta del vénturi, el fluido comienza a recuperar presión estática debido a la expansión del área de flujo, hasta un valor superior al de la presión atmosférica en un punto localizado antes de los pequeños agujeros, lo anterior permite la salida de la mezcla reactiva por los agujeros en los cuales se forman las llamas. La mezcla aire / gas que circula por el tubo debe tener una velocidad tal que impida que la llama que se forma en el extremo superior después de la ignición inicial, penetre en el interior del quemador. La reacción de combustión no finaliza en la región del cono, existe un manto luminoso exterior al cono donde se completa la combustión del gas residual por medio de la difusión del aire secundario dentro de ese manto. La tuerca 7 sirve para regular la cantidad de aire primario inducido.



Figura 2: Quemador del horno de la cocina de uso doméstico.

1-inyector (ciclor), 2- cono, 3- cuello, 4-difusor, 5-cabeza con los agujeros. (2,3,4 forman el mezclador o vénturi) 7-tuerca reguladora del caudal de aire primario.

Las llamas, en este caso, son parcialmente premezcladas porque el gas entra a la cámara de combustión mezclado con una parte de aire, necesario para la combustión y otra parte, entra al calientaplatos por los agujeros que se encuentran en la parte posterior e inferior.

Para iniciar este trabajo el fabricante proporcionó las dimensiones de la cocina, el consumo de gas que depende del tipo del inyector utilizado y la conductividad térmica del material de las paredes y de la bandeja.

Datos iniciales:

Flujo volumétrico del gas-butano: Qg = 0.1558 m3 /hLa conductividad de las paredes y de la bandeja: k = 0,075 W/m*K

Cantidades por determinar

Mediante la solución numérica se pretende determinar las temperaturas y direcciones de flujo de gases calientes dentro del horno. Luego esta información puede ser utilizada para modificar las dimensiones, formas, parámetros de funcionamiento y buscar las soluciones óptimas.

2.4. Identificación del dominio.

Para simplificar el problema es necesario aislar el horno del sistema completo (cocina completa), pero esto debe hacerse de tal forma que podamos definir perfectamente las condiciones de contorno. Para la simulación del horno en condiciones de contorno es necesario saber la temperatura, velocidad y dirección de gas caliente que sale del calientaplatos, y de esta información no disponemos, por eso no podemos aislar el horno del calientaplatos. Para el análisis del calientaplatos tenemos que saber la velocidad, dirección y composición de la mezcla gas-aire que sale del quemador, la velocidad y la dirección no sabemos, por eso tampoco podemos aislar el horno y calientaplatos del quemador. Para el análisis del quemador necesitamos el caudal del gas, y la dirección de entrada del gas al quemador y esta información es proporcionada por el fabricante. Aislamos nuestro sistema quemador-calientaplatos-horno del resto de partes de la cocina. También prescindimos de las paredes, porque no nos interesa la distribución de la temperatura dentro de ellas.

Considerando lo anterior nuestro sistema tiene que empezar desde la entrada del gas al quemador y terminar en la salida de gas de combustión del horno. En la simulación del desplazamiento de la mezcla gas-aire dentro del quemador y del desplazamiento de gases de combustión dentro del horno el dominio es el fluido; en la simulación del proceso de combustión el dominio es el fluido reactante.

Número de dimensiones del modelo

A pesar de que los problemas uni y bidimensionales son mucho más fáciles de abordar, en nuestro caso estos modelos se separarían mucho de la realidad, debido a que la irregularidad de temperatura se da en tres direcciones espaciales. Por las mismas razones no se puede usar simetría axial.

Modelos físicos incluidos en el análisis

En el análisis de distribución de temperaturas y de direcciones de flujo de gases de combustión se incluirá el modelo de turbulencia, de combustión y de radiación.

La hipótesis

Puesto que en el análisis de las condiciones de operación de un horno algunos detalles pueden ser obviados y a fin de obtener un modelo matemático cuya resolución numérica sea abordable con tiempos de cálculo que no pasen de unas pocas horas, es necesario hacer varias hipótesis simplificadoras.

- 1). Las temperaturas de gases y de las paredes del horno son estacionarias.
- 2). El fluido se considera incompresible (el número de Mach<1).

3). La variación de la densidad del fluido con la presión puede ser ignorada (en simulaciones de combustión a presión atmosférica, la variación de la densidad se da por parte de la temperatura y no por la presión).

- 4). No se considerará la distribución de calor en las paredes.
- 5). La composición de la mezcla gas-aire es homogénea.
- 6). La combustión es estequiométrica.

Debido a su complejidad, el problema debe dividirse en 3 etapas diferenciadas:

ΕΤΑΡΑ	SIMULACION	ESTADO
1	Simulación del desplazamiento de la mezcla butano-aire dentro del quemador que sirve para obtener el campo de velocidad de la mezcla en la salida del quemador	Estacionario
2	Simulación del proceso de combustión en la parte inferior de la cocina (calientaplatos)	Estacionario
3	Simulación de la distribución de gas de combustión en el horno de la cocina	Estacionario

2.5. Selección de software

Actualmente, si bien se puede encontrar una gran variedad de códigos para la resolución numérica de problemas de dinámica de fluidos, la realidad es que este mercado se en-

cuentra monopolizado por el grupo norteamericano Fluent Inc. cuyo principal software es FLUENT. La competencia más importante de este grupo dentro del ámbito de los CFD es la del grupo ANSYS con el software ANSYS-CFX. En muchas ocasiones no se trata de dar los mejores resultados en una determinada aplicación para dominar un mercado sino de tener una buena estrategia de marketing y es quizás en esto donde sobresale este grupo: en primer lugar se encuentran presentes en todas las ramas en las que puede ser necesaria aplicación del CFD. En segundo lugar, va creando la necesidad del uso de dicha herramienta en el proceso de formación del ingeniero al ofrecer versiones educacionales en las universidades. Finalmente, y quizás es la gran ventaja que tienen sobre los pequeños grupos, ofrece un enorme asesoramiento técnico a sus clientes: asesora en la estrategia que se debe seguir para alcanzar los objetivos, dan una formación para el manejo del software.

Para la realización del presente trabajo se optó por el programa Ansys-CFX v.11, debido a que para el uso de FLUENT se requiere de software adicional para la creación de geometría y mallado.

Otra razón por la que Ansys-CFX v.11 fue seleccionado para el trabajo es porque es uno de los numerosos softwares de ANSYS, los cuales son compatibles entre sí. Con ANSYS-CFX se puede realizar el estudio de la interacción fluidos-estructuras. Además, este software ofrece todas las herramientas necesarias para un estudio: creación de la geometría, mallado, resolución y post-procesado. De esta manera, el usuario no tiene por qué enfrentarse a los problemas que ofrecen programas menos conocidos como puede ser el no reconocimiento de la geometría o el mallado a la hora de realizar el estudio en un CFD determinado o la imposibilidad de acoplar resultados del fluio y de la estructura. El programa proporciona rápidamente los resultados exactos del CFD. La versatilidad y capacidad de adecuación a las necesidades del usuario mediante la posibilidad de programación de funciones que permite la puesta en práctica de los nuevos modelos. Aun así, el código CFX pone a su disposición multitud de opciones entre las cuales están modelos para diferentes procesos físicos y químicos que le dan una enorme versatilidad. De esta manera, no sólo se puede realizar simulaciones de flujos laminares o turbulentos (incluye transición), newtonianos o no newtonianos, compresibles o incompresibles, monofásicos o multifásicos, sino también procesos de transferencia de calor por radiación, conducción y por supuesto por convección, así como procesos de fundición y con reacciones químicas, como combustión de gases, líquidos y combustibles sólidos. La disposición del solver y del post-processing interactivos del ANSYS -CFX hacen fácil detener un cálculo, examinar los resultados con el post-procesador, cambiar cualquier ajuste, y después continúar con el cálculo dentro de un solo uso. Los ficheros del caso y de datos pueden también ser leídos en el post-procesador de ANSYS para el análisis adicional con las herramientas avanzadas del post-processing y comparar resultados de diversos casos de lado a lado.

CAPÍTULO III PREPROCESO

3.1. Introducción

En la etapa de preproceso se define la geometría del caso de estudio. El volumen de estudio se discretiza dividiéndolo en celdas de modo que el conjunto forma una malla (mesh). Se establecen también las condiciones de contorno, las condiciones iniciales y el modelo matemático a emplear.

3.2. Creación de una geometría tridimensional

Para la simulación, a partir de los planos proporcionados por el fabricante se creó una geometría tridimensional mediante el programa Inventor v.11. La geometría mantiene las características relevantes para capturar el flujo pasando por alto detalles que a nivel de fabricación son esenciales pero desde el punto de vista de los procesos físicos que ocurren se consideran de nula importancia (por ejemplo tornillos, perillas, etc.).

La geometría de la cocina (figura 3 a,b) está dividida en 3 dominios: quemador (figura 3 c), calientaplatos (figura 3 d), y horno (figura 3 e), considerando sólo el volumen ocupado por el fluido. La geometría simplificada carece de áreas pequeñas, salvo las de entrada y salida para evitar un número muy grande de los elementos en el proceso de mallado.

Para el análisis se escogió la cocina a gas de uso doméstico con las siguientes dimensiones:

Cámara de combustión: ancho 660 mm, profundidad 433.8 mm, alto 220 mm, 7 orificios de entrada de aire secundario de area de 196.35 mm2 cada uno y 2 ranuras laterales de 11,712.6 mm2 de area;

Horno: ancho 660 mm, profundidad 433.8 mm, alto 370 mm, 2 orificios de 725,097 mm2 de area y 2 de 881,097 mm2; la camara de combustión y el horno tienen 16 orificios a los lados de 432 mm2 de área cada uno y un orificio central de 534.3 mm2 de área.

Quemador: 417 mm longitud de la cabeza, 187 mm. desde el inyector de gas hasta la cabeza, 116 agujeros de diámetro 2.38 mm, la distancia entre los agujeros es de 6 mm, el diámetro de la cabeza es de 22.2 mm;



Figura 3 a. Cocina completa.



Figura 3 b. Volumen ocupado por el fluido en diferentes zonas de la cocina.



Figura 3 c. Quemador.



Figura 3 d. Calientaplatos



Figura 3 e. Horno

3.3. Discretización espacial [15], [13]

El objetivo de un código de CFD es la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes para un flujo con unas características determinadas y para una geometría concreta. El código de CFD resuelve dichas ecuaciones en una serie de puntos de la geometría en cuestión mediante métodos numéricos que transforman las ecuaciones diferenciales en ecuaciones algebraicas, proceso que se denomina "discretización espacial". Por tanto, el primer paso que se da en la resolución de las ecuaciones es la selección de los puntos en los que se llevará a cabo la discretización, operación que se denomina "generación del mallado". Para generar la malla, el dominio se divide en pequeños subdominios llamados elementos (figura 4).



Figura 4. División del dominio en subdominios.

La geometría de éstos depende del número de dimensiones sobre las que estemos trabajando y de las características del problema:

• Problemas unidimensionales: segmentos de la línea que forma el dominio.

• Problemas bidimensionales: triángulos y cuadriláteros (figura 5). Los cuadriláteros se ajustan mejor a dominios cuadriláteros, mientras que los triángulos se suelen utilizar para dominios con una geometría más compleja. De hecho, cualquier dominio puede ser discretizado exclusivamente con triángulos, y no así con cuadriláteros.

• Problemas tridimensionales: tetraedros, piramides, hexaedros y prismas (figura 6). Los tetraedros son los elementos más simples y se ajustan bien a cualquier geometría, pero para superficies cilíndricas los hexaedros proporcionan mejor ajuste.



Figura 6. Elementos usados para mallar geometrías tridimensionales.

El mallado generado puede ser de dos tipos según los ejes coordenados que utilice:

Mallado body-fitted, (figura 7), donde los puntos del mallado coinciden con la frontera física.

Mallado en coordenadas cartesianas, (figura 8), donde las líneas del mallado son paralelas a los ejes cartesianos, independientemente de la forma de la frontera física.



Figura 7. Ejemplo de mallado body-fitted.



Figura 8. Ejemplo de mallado en coordenadas cartesianas.

La principal ventaja del mallado body-fitted es que permite soluciones muy exactas del flujo cerca de la frontera en el caso de geometrías muy complicadas a pesar de que requiere técnicas de construcción muy complejas. Por el contrario, el mallado en coordenadas cartesianas, si bien se construye muy fácilmente y tiene una mayor simplicidad en la resolución del flujo, es aplicable únicamente a geometrías muy sencillas ya que no permite un buen tratamiento de las condiciones de frontera. Por tanto, debido a las importantes limitaciones del mallado en coordenadas cartesianas, es el mallado body-fitted el más usado dentro del mundo de la industria, donde abundan geometrías y condiciones de contorno muy complejas.

Existen muchos métodos para la discretización de las ecuaciones de Navier- Stokes. Las diferentes técnicas de discretización requieren siempre uno de los siguientes tipos de mallado:

Mallado estructurado: Cada punto del mallado se identifica de manera exclusiva con los índices i, j, k del sistema de coordenadas cartesianas. Las celdas serán cuadriláteros en el caso de 2D y hexaedros en el caso de 3D.

Mallado no-estructurado: Ni las celdas ni los nodos del mallado siguen un orden particular, es decir, las celdas vecinas no pueden identificarse por sus índices cartesianos (por ejemplo, la celda 6 estaría junto a la celda 128). Las celdas serán triángulos y cuadriláteros en el caso de 2D y tetraedros, prismas, hexaedros y pirámides en el caso de 3D.

El tipo de discretización espacial a emplear, depende del tipo de discretización de las ecuaciones empleado, así como de la estructura interna de datos empleados para resolver el flujo. El método de las diferencias finitas, que discretiza las ecuaciones de Navier-Stokes en forma diferencial, requiere una malla estructurada de puntos en los que se guardan las variables de flujo. Por otro lado, en el método de los volúmenes finitos es necesario definir puntos de control en cada volumen generado. Precisamente es, en esos vértices donde se guardan las variables que, dependiendo del método que se

emplee pueden ser definidos en el centro del elemento (cel l-centred) o en los vértices (cel l vertex) de las celdas. (figura 9).



Figura 9. Mallas con nodos centrados en los elementos y centrados en los vértices.

Mallas estructuradas

La principal ventaja de los mallados estructurados reside en la ordenación de los elementos en memoria, va que de esta forma, el acceso a las celdas vecinas a una dada resulta muy rápido y fácil, sin más que sumar o restar un número al valor del índice correspondiente. Las mallas estructuradas pueden representarse en un sistema cartesiano o curvilíneo. En el primer caso, las líneas que configuran las celdas son siempre paralelas al sistema de ejes coordenados; por el contrario, en los sistemas curvilíneos, el sistema de coordenadas es deformado para adaptarse a la geometría del objeto de estudio. Por otro lado, también pueden clasificarse en mallas ortogonales y mallas no ortogonales. Las mallas ortogonales son aquellas en las que todas las líneas que la configuran se cortan entre sí con un ángulo de 90°. Algunos flujos pueden considerarse como axisimétricos; en estos casos, las ecuaciones de flujo pueden ser expresadas en coordenadas polares (r, θ), en vez de en coordenadas cartesianas (x, y). Otra metodología, relacionada con los mallados estructurados, es la llamada técnica de la quimera. La idea básica es generar en primer lugar, mallas separadas alrededor de cada una de las entidades geométricas en el dominio. Después, las mallas se combinan de forma que se produzcan solapes de elementos. Lo más importante es la transferencia precisa de las cantidades entre las diferentes mallas y la región donde se produce el solape. La ventaja de esta metodología de mallado es que se pueden generar mallas para problemas particulares sin tener que generar mallas particulares, independientes unas de otras. Por otro lado, el problema de la técnica de la quimera es que la conservación de las propiedades de las ecuaciones de gobierno del fluido no son satisfechas exactamente en la zona donde se produzca solape de mallas.

Mallas no estructuradas

El segundo tipo de mallas, son los mallados no estructurados. Éstos ofrecen gran flexibilidad en el tratamiento de geometrías complejas. La principal ventaja de los mallados no estructurados reside en que los triángulos (2-D) o los tetraedros (3-D), se pueden generar automáticamente, independientemente de la complejidad del dominio. En la práctica, es necesario determinar unos parámetros adecuadamente para obtener una buena calidad de malla. El tiempo requerido por una computadora para generar un mallado no estructurado es mucho menor que el que requiere para uno estructurado. Otra ventaja de este tipo de metodología es que la solución obtenida depende del refinamiento que se realice de la malla. Una desventaja de este tipo de mallado es el espacio que la malla ocupa en una computadora, es decir, requiere más memoria que los mallados estructurados.

El mallado estructurado ofrece su mayor ventaja en el menor coste computacional que presenta dado que, a la posición de memoria en que se almacena la información correspondiente a un nodo, le sigue la información correspondiente al nodo adyacente, lo que permite una mayor rapidez en la realización del cálculo. No obstante este tipo de mallado no es muy sencillo adaptarlo a geometrías complejas. Sin embargo existe una solución que permite en geometrías complejas aprovechar la gran ventaja del mallado estructurado y que se denomina "mallado en multibloques". Este mallado consiste en dividir la geometría en diferentes bloques, cada uno de ellos con una finura de mallado según las exigencias; así, los bloques mas próximos a la frontera tendrán mallados muy finos mientras que los bloques más alejados tendrán mallados menos finos. Sin embargo presenta la desventaja de requerir un código más complejo ya que será necesario pasar la información de los nodos de un bloque a los nodos de otro bloque diferente.

A su vez, los mallados estructurados multibloques pueden ser conformes o no-conformes. Los mallados no-conformes son aquellos en los que los nodos de un bloque no tienen por qué coincidir con los nodos de otro bloque adyacente, por lo que el número de líneas de los bloques no tienen por qué ser iguales añadiendo mayor flexibilidad al mallado en multibloques. No obstante también será requerido un mayor tiempo en la elaboración del mallado. Respecto al mallado no estructurado, su ventaja principal es la posibilidad de la realización de un mallado automático por lo que es muy recomendable para casos de geometrías muy complejas. Además, el tiempo necesario para construir este tipo de mallados es considerablemente inferior al necesario para construir un mallado estructurado en multibloques. No obstante, dada la forma de almacenar la información en memoria, se requieren computadoras con mejores características que las que se podrían utilizar en un mallado estructurado o bien un mayor tiempo de cálculo.

En el mundo de la industria, la elección de un mallado adecuado es fundamental a la hora de obtener una solución lo más exacta posible y sobre todo, en términos de ahorro de tiempo, ya que no sólo importa el tiempo empleado en la construcción del mallado

sino también el tiempo necesario para realizar el cálculo que, como hemos visto, depende de forma importante del tipo de mallado seleccionado. Actualmente, la mayor parte de los códigos emplean bien mallados no-estructurados o bien mallados híbridos que utilizan elementos rectangulares en 2D y hexaédricos en 3D y suponen una buena solución de compromiso entre exactitud, rapidez y requerimientos para la computadora. En el presente provecto, los mallados empleados en todas partes de la cocina han sido mallados no-estructurados con elementos tetraédricos v. en las zonas de forma cilíndrica como en caso del quemador, con elementos piramidales y prismáticos. Se podría haber elegido también un mallado estructurado de un solo bloque pero la solución ofrecería poca exactitud en determinadas zonas del dominio como pueden ser las entradas / salidas de aire. Otra posibilidad sería un mallado estructurado multibloques, pero la geometría es relativamente compleja por lo que el mallado se realiza más rápidamente mediante el mallado no-estructurado. Por último, las características de las computadoras permitían desarrollar el cálculo en un tiempo dentro de lo habitual a pesar de que el mallado no- estructurado requiere tiempos de computación mayores que para un mallado estructurado.

La complejidad de la física involucrada junto al tamaño del dominio definen a grandes rasgos el tamaño del problema y la potencia de cálculo necesaria. La densidad de nodos o elementos puede cambiar de unas regiones a otras debiendo acumular un mayor número de ellos en las zonas donde se esperan fuertes variaciones de alguna variable. En nuestro caso mallamos más intensamente la entrada de mezcla al quemador, salidas de la mezcla del quemador, entradas de aire secundario, fugas de aire, entradas de gases calientes al horno y salida de gases del horno (figuras 10,11 y 12), previamente asignando a estas zonas nombres, para la identificación de estas regiones en el momento de asignación de las condiciones de contorno. Por tratarse de una simulación en tres dimensiones, los elementos usados son tetraedros, pirámides y prismas.

Cada celda de la malla será un punto de cálculo. Cuanto más pequeñas sean las celdas, de más valores por unidad de volumen dispondremos, con ello el resultado de la simulación se ajustará más a la realidad. Por otro lado, más ecuaciones a resolver tendrá el simulador CFX, con lo que mayor será el tiempo de cálculo al necesitar mayor consumo de memoria del ordenador. Así pues, se trata de generar una malla óptima, de forma que se ajuste a nuestra estructura y que pueda ser calculada por nuestro ordenador.

Las herramientas que permiten un control directo sobre la distribución del tamaño de las celdas, pudiendo especificar los siguientes parámetros:

- Expansión Factor-tasa de crecimiento de la malla
- Máximum Edge Length-valor máximo permitido de la malla
- Mínimum Edge Length-valor mínimo permitido de la malla

Los parámetros escogidos de todas las mallas aparecen en las tablas 1, 2 y 3 y los datos informativos de las mallas están en las tablas 4, 5 y 6.

quemador			Default Body Spacing	
Location	1 Composite		Maximum Spacing [mm]	22
Maximum Thickness [mm]	22		salida mezcla	
Default Face Spacing		Option	Relative Error	
Option	Angular Resolution		Relative Error	0.0123116
Angular Resolution [Degrees]	30		Minimum Edge Length [mm]	0.1
Minimum Edge Length [mm]	0.5		Maximum Edge Length [mm]	0.3
Maximum Edge Length [mm]	22		Radius of Influence [mm]	0
Inflation		Expansion Factor	1.2	
Number of Inflated Layers	5		Location	2 Composites
Expansion Factor	1.2		entrada mezcla	
Number of Spreading Iterat	0		Option	Relative Error
Minimum Internal Angle [De	2.5		Relative Error	0.292
Minimum External Angle [D	10.0		Minimum Edge Length [mm]	0.5
Inflation Option	1		Maximum Edge Length [mm]	1
Option	Total Thickness		Radius of Influence [mm]	0
Thickness Multiplier	1		Expansion Factor	1.2
· · ·	1		Location	1 Composite

Tabla 1. Parámetros seleccionados para el mallado del quemador

Default Body Spacing		entrada mezcla	
Maximum Spacing [mm]	40	Option	Relative Error
Inflation		Relative Error	0.0123116
	-	Minimum Edge Length [mm]	0.1
Number of Inflated Layers	5	Maximum Edge Length [mm]	0.3
Expansion Factor	1.2	Radius of Influence [mm]	0
Number of Spreading Iterat	0	Expansion Factor	1.2
Minimum Internal Angle [De	2.5		2 Composites
Minimum External Angle [D	10.0		2 Composicos
Inflation Option		Default Face Spacing	
Option	Total Thickness	Option	Angular Resolution
Thickness Multiplier	1	Angular Resolution [Degrees]	30
Face Spacing 1		Minimum Edge Length [mm]	0.5
Option	Angular Resolution	Maximum Edge Length [mm]	40
Angular Resolution [Degrees]	18	salida	
Minimum Edge Length [mm]	1	Option	Angular Resolution
Maximum Edge Length [mm]	4	Angular Resolution [Degrees]	18
Radius of Influence [mm]	0	Minimum Edge Length [mm]	0.5
Expansion Factor	1.2	Maximum Edge Length [mm]	4
Location	21 Composites	Radius of Influence [mm]	0
Stretch		Expansion Factor	1.2
Stretch in X	0.5	Location	18 Composites
Stretch in Y	0.5	L	
Stretch in Z	0.5		

Tabla 2. Parámetros seleccionados para el mallado del calientaplatos

Face Spacing 1		salida	
Option	Angular Resolution	Option	Angular Resolution
Angular Resolution [Degrees]	18	Angular Resolution [Degrees]	18
Minimum Edge Length [mm]	1	Minimum Edge Length [mm]	0.5
Maximum Edge Length [mm]	4	Maximum Edge Length [mm]	4
Radius of Influence [mm]	0	Radius of Influence [mm]	0
Expansion Factor	1.2	Expansion Eactor	1.2
Location	21 Composites	Location	18 Composites
Default Face Spacing		Location	To Compositos
Option	Angular Resolution		
Angular Resolution [Degrees]	22		
Minimum Edge Length [mm]	1.7		
Maximum Edge Length [mm]	33		

Tabla 3. Parámetros seleccionados para el mallado del horno.



10 a



10 b

10 c



Information

Mesh statistics

Total number of nodes	162646
Total number of tetrahedra	692580
Total number of pyramids	11296
Total number of prisms	61006
Total number of elements	764882

Tabla 4. Datos informativos de la malla del quemador



11 a





11 с

Figura 11 a, b, c. Calientaplatos mallado

Information

Mesh statistics

Total number of elements	832059
Total number of prisms	49798
Total number of pyramids	8358
Total number of tetrahedra	773903
Total number of nodes	171776

Tabla 5. Datos informativos de la malla del calientaplatos.





Information

Mesh statistics

Total number of elements	225309
Total number of prisms	0
Total number of pyramids	0
Total number of tetrahedra	225309
Total number of nodes	42807

Tabla 6. Datos informativos de la malla del horno.

3.4. Desarrollo del modelo matemático.

3.4.1. Introducción.

Resolver el problema de la combustión de gas butano en un horno de la cocina de uso doméstico, implica la simulación de todos los procesos que tienen lugar en el hogar:

- 1. Modelo de turbulencia
- 2. Modelo de combustión
- 3. Modelo de radiación

A continuación se detallan estos modelos, particularizando su aplicación al caso de estudio de este trabajo de tesis.

El sistema de ecuaciones que describe el comportamiento del fluido es distinta en cada etapa.

En la etapa 1 tenemos el flujo turbulento, isotérmico de la mezcla gas-aire; en esta etapa nos interesa la dirección y velocidad de salida del quemador de la mezcla que importaríamos como condiciones iniciales para la etapa 2.

En la etapa 2 tenemos fluido turbulento con reacción química. Al resolver el sistema de ecuaciones correspondiente a este caso obtenemos el campo de temperatura y de velocidad del flujo de gases de combustión en las entradas al horno y también la distribución de temperatura en la bandeja que vamos a utilizar como condiciones iniciales en la etapa 3.

En la etapa 3 tenemos el flujo de gases de combustión dentro del horno; en esta etapa determinaremos la distribución de calor dentro del horno y las direcciones de flujo de gases.

3.4.2. Ecuaciones de conservación [16] [8]

El ingeniero francés Claude-Louis Navier (1822) y el matemático inglés George Stokes (1842-1850) escribieron las ecuaciones básicas que describen el movimiento de un fluido, a las cuales se les conoce como "ecuaciones de Navier-Stokes". Estas ecuaciones expresan en el lenguaje del medio continuo las tres leyes de conservación de la masa, ecuación de conservación del momentum y la ecuación de conservación de la energía. La ecuación de continuidad (conservación de masa) se basa en la ley de conservación de la masa. Aplicando al concepto de movimiento de un fluido, la tasa de variación de la masa en un volumen de control es equivalente a la diferencia de la masa que entra y sale a través de sus fronteras.

Tasa de variación		Tasa neta del
de masa en un	=	flujo másico en
elemento fluido		el elemento fluido

La tasa de variación de masa en el volumen fluido es:

$$\frac{d\rho}{dt}\delta x\delta y\delta z$$
(3.1)

El cambio del flujo másico que cruza la cara del elemento fluido que viene dada por el producto de la densidad, el área y la velocidad normal a la cara. En la figura 7 se puede analizar que el cambio neto del flujo másico que pasa a través de las fronteras del elemento fluido se escribe de la siguiente forma:



Figura 13. Flujo másico que entra y sale de un elemento fluido.

$$\left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right)\delta y \delta z - \left(\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right)\delta y \delta z + \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y}\frac{1}{2}\delta y\right)\delta x \delta z - \left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y}\frac{1}{2}\delta y\right)\delta x \delta z + \left(\rho w - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z}\frac{1}{2}\delta z\right)\delta x \delta y - \left(\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z}\frac{1}{2}\delta z\right)\delta x \delta y$$

$$(3.2)$$

La tasa de variación de la masa que se encuentra dentro del elemento se iguala a la tasa neta del flujo másico que cruza las fronteras del mismo. Acomodando todos los términos del resultado del balance másico a la izquierda de la ecuación nos queda:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0$$
(3.3a)

En forma contraída:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0$$
(3.3b)

Asumiendo que el fluido es incompresible, la densidad ρ es constante y la ecuación se convierte en la siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$
(3.4)

la cual también puede escribir de forma reducido en notación vectorial:

$$div(u) = 0 \tag{3.5}$$

Ecuación de Conservación del momentum

Se deriva de la aplicación del concepto de la segunda ley de Newton a un fluido en movimiento. La ecuación del momentum se expresa en términos de la presión y los esfuerzos debido a la viscosidad actuando sobre una partícula fluida. La tasa de variación del momentum en una partícula fluida es la diferencia de las fuerzas totales debido a los esfuerzos de la superficie y las fuerzas volumétricas que actúan sobre ella.

Tasa de variación		Suma de las
del momentum de una	=	fuerzas sobre una
partícula fluida		partícula fluida

La tasa de variación del momentum en cada dirección por unidad de volumen de u volumen fluido viene dado de la siguiente forma en cada dirección coordenada:

$$\rho \frac{Du}{Dt} \qquad \rho \frac{Dv}{Dt} \qquad \rho \frac{Dw}{Dt}$$
(3.6)

Sobre un volumen fluido se distinguen dos tipos de fuerzas:

Fuerzas de superficie:

- Fuerza de presión
- Fuerzas viscosas

Fuerzas volumétricas:

- Fuerza gravitatoria
- Fuerza centrífuga
- Fuerza electromagnética
- etc.

Es muy común colocar la contribución de las fuerzas superficiales en términos separados en la ecuación de momentum e incluir también los efectos de las fuerzas volumétricas como términos fuentes.

El estado de esfuerzos sobre un volumen fluido esta definido en términos de la presión y las nueve componentes del tensor de esfuerzos mostrados en la figura 2. La presión, que es un esfuerzo normal, se denota como *p*. Los esfuerzos se denotan como τ . La notación en subíndices τ_{ij} sirve para denotar la dirección del esfuerzo. El sufijo *i* y el *j* en τ_{ij} indican que la componente del esfuerzo actúa en la dirección *j* en una superficie normal en la dirección *i*.


Figura 14. Esfuerzos superficiales sobre las caras de un elemento fluido.

Primero se considera el componente x de las fuerzas debido a la presión p y los esfuerzos τ_{xx} , τ_{yx} y τ_{zx} . La magnitud de la fuerza resultante de un esfuerzo de superficie es el producto del esfuerzo y del área. Las fuerzas que actúan en sentido positivo del *ee* un eje coordenado tienen signo positivo y si la fuerza va en sentido opuesto adquiere signo negativo. La fuerza neta en la dirección x es la suma de las componentes que actúan en esa dirección sobre el volumen fluido.

La fuerza neta en las caras paralelas al plano yz en dirección x está dada por:

$$\begin{bmatrix} \left(p - \frac{\partial p}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right) - \left(\tau_{xx} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right) \end{bmatrix} \delta y \delta z + \left[-\left(p + \frac{\partial p}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right) + \left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right) \right] \delta y \delta z = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}\right) \delta x \delta y \delta z$$

$$(3.7)$$

La fuerza neta en las caras paralelas al plano xz en dirección x esta dada por:

$$-\left(\tau_{yx}-\frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y}\frac{1}{2}\delta y\right)\delta x\,\delta z + \left(\tau_{yx}+\frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y}\frac{1}{2}\delta y\right)\delta x\,\delta z = \frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y}\,\delta x\,\delta y\,\delta z$$

(3.8)

y finalmente la fuerza neta en las caras paralelas al plano *xy* en dirección *x* esta dada por:

$$-\left(\tau_{zx} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z\right) \delta x \, \delta y + \left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z\right) \delta x \, \delta y = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \, \delta x \, \delta y \, \delta z$$
(3.9)

La fuerza total por unidad de volumen sobre el fluido debido a estos esfuerzos de superficie es igual a la suma de (3.7), (3.8), (3.9) y dividida por el volumen $\delta x \delta y \delta z$

$$\frac{\partial(-p+\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z}$$
(3.10)

Pero a esta ecuación se le deben incluir los efectos de las fuerzas volumétricas como termino fuente SMX de el componente x del momentum por unidad de volumen. El componente x de la ecuación del momentum es el cambio del momentum en el volumen fluido igualado a las fuerzas totales en la dirección x debido a los esfuerzos de superficie más la tasa de variación del momentum en el componente x debido a las fuerzas:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial (-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx}$$
(3.11)

De la misma forma se verifica que el componente *y* de la ecuación del momentum está dado por:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial (-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{My}$$
(3.12)

De la misma forma se verifica que el componente *z* de la ecuación del momentum está dado por:

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial (-p + \tau_{zz})}{\partial z} + S_{Mz}$$
(3.13)

Tensor de esfuerzos viscosos

Los esfuerzos viscosos, originados de la interacción entre_el fluido y la superficie del elemento, se representan mediante el tensor de tensiones τ . En coordenadas cartesianas se escribe de la siguiente manera:

$$\bar{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}$$
(3.14)

Las componentes τ_{xx} , τ_{yy} y τ_{zz} , representan las tensiones normales y el resto de componentes que forman el tensor, $\overline{\tau}$, representan los esfuerzos cortantes que actúan sobre el dominio fluido. En la figura 15 se representan todos los esfuerzos para un cubo infinitesimal.



Figura 15 (a), (b). Esfuerzos normales y tangenciales actuando sobre un elemento fluido.

La mayoría de los fluidos presentes en problemas comunes, se pueden considerar como newtonianos. De esta forma, los componentes del tensor de esfuerzos viscosos quedan:

$$\tau_{xx} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\tau_{yy} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}$$

$$\tau_{xx} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z}$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

(3.15)

que se escriben en forma contraída como:

$$\tau_{ij} = \lambda u_{k,k} \delta_{ij} + \mu \left(u_{i,j} + u_{j,i} \right)$$

$$\lambda = -\frac{2}{3} \mu$$

$$(3.16)$$

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

$$(3.17)$$

en donde λ representa el segundo coeficiente de viscosidad, y μ el coeficiente de viscosidad dinámica, δ_{ij} es la función delta Kronecker $\delta_{ij} = 1$ si $i \neq j$ y $\delta_{ij} = 0$ si i = j

Introduciendo las ecuaciones (3.15) en las ecuaciones (3.11), (3.12), y (3.13) se obtiene:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \, div \, \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + S_{Mx}$$

(3.18)

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \, div \, \mathbf{u} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + S_{My}$$

(3.19)

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \, div \, \mathbf{u} \right] + S_{Mz}$$

(3.20)

Las ecuaciones de Navier-Stokes se pueden escribir de la forma más útil para el desarrollo del método de volúmenes finitos:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + div(\mu \text{ grad } u) + S_{Mx}$$
(3.21)

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + div(\mu \ grad \ v) + S_{My}$$
(3.22)

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + div(\mu \ grad \ w) + S_{Mz}$$
(3.23)

La ecuación de conservación de la energía se basa en la primera ley de la termodinámica, es decir, el cambio de energía de una partícula fluida es la diferencia entre el trabajo realizado sobre la partícula y el calor suministrado. La ecuación de la energía describe el transporte de la energía a través de un fluido y sus efectos.

Tasa de variación de la energía en una	=	Tasa neta del calor adicionado a una	+	Tasa neta de trabajo realizado sobre una
Partícula fluida		partícula fluida		partícula fluida

La tasa de incremento de la energía de una partícula por unidad de volumen esta dada por:

$$\rho \frac{DE}{Dt}$$
(3.24)

Trabajo realizado por las fuerzas superficiales

La tasa de trabajo neto realizado sobre el volumen fluido por una fuerza de superficie es igual al producto de la fuerza y el componente de la velocidad en la dirección de la fuerza. Las fuerzas dadas por las ecuaciones (3.7), (3.8), (3.9) que actúan en la dirección x.

El trabajo realizado por estas fuerzas esta dado por:

$$\begin{bmatrix} \left(pu + \frac{\partial(pu)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x\right) - \left(\tau_{xx}u - \frac{\partial \tau_{xx}u}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x\right) \\ - \left(pu + \frac{\partial(pu)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x\right) + \left(\tau_{xx}u + \frac{\partial(\tau_{xx}u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x\right) \end{bmatrix} \delta y \delta z \\ + \left[- \left(\tau_{yx}u - \frac{\partial(\tau_{yx}u)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y\right) + \left(\tau_{yx}u + \frac{\partial \tau_{yx}u}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y\right) \right] \delta x \delta z \\ + \left[- \left(\tau_{zx}u - \frac{\partial(\tau_{zx}u)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z\right) + \left(\tau_{zx}u + \frac{\partial \tau_{zx}u}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z\right) \right] \delta x \delta y \end{cases}$$

$$(3.25)$$

La tasa de trabajo neto realizado por estas fuerzas superficiales actuando en la dirección *x* esta dado por:

$$\left[\frac{\partial [u(-p+\tau_{xx})]}{\partial x} + \frac{\partial (u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial (u\tau_{zx})}{\partial z}\right] \delta x \, \delta y \, \delta z$$
(3.26)

Las componentes de los esfuerzos de superficie en la dirección y y z también realizan trabajo sobre la partícula y se puede comprobar que siguiendo el proceso anterior se llega a las siguientes ecuaciones respectivamente:

$$\left[\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial[v(-p+\tau_{yy})]}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z}\right] \delta x \delta y \delta z$$

$$(3.27)$$

$$\left[\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial[w(-p+\tau_{zz})]}{\partial z}\right] \delta x \delta y \delta z$$

$$(3.28)$$

La tasa total de trabajo realizado por unidad de volumen sobre la partícula fluida por todas las fuerzas superficiales esta dada por la suma de (3.26), (3.27), (3.28) dividido

por el volumen $\delta x \delta y \delta z$. Los términos que contienen la presión se pueden agrupar y escribirse en forma vectorial:

$$-\frac{\partial(up)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} = div(pu)$$
(3.29)

)

Esto conlleva la tasa total de trabajo realizado sobre la partícula por los esfuerzos superficiales.

$$\begin{bmatrix} -div(\rho u) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} -div(\rho u) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} (3.30) \end{bmatrix}$$

Flujo de energía debido a la conducción de calor

El vector de flujo de calor tiene tres componentes q_x , q_y y q_z :



Figura 16. Vectores de calor de un elemento fluido.

La tasa de transferencia neta de calor hacia un volumen fluido debido al flujo de calor en la dirección *x* esta dada por la diferencia entre la tasa de calor impuesta sobre la cara oeste y la tasa de calor perdida en la cara este:

$$\left[\left(q_{x}-\frac{\partial q_{x}}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right)-\left(q_{x}+\frac{\partial q_{x}}{\partial x}\frac{1}{2}\delta x\right)\right]\delta y\delta z=-\frac{\partial q_{x}}{\partial x}\delta x\delta y\delta z$$
(3.31)

De manera similar la tasa neta de transferencia de calor hacia el fluido debido al flujo de calor en la dirección y y z

$$-\frac{\partial q_{y}}{\partial y} \delta x \delta y \delta z \quad ^{y} \quad -\frac{\partial q_{z}}{\partial z} \delta x \delta y \delta z$$

$$(3.32 \text{ a, b})$$

La tasa total de calor adicionado al volumen fluido por unidad de volumen debido al flujo de calor a través de las fronteras es la suma de las ecuaciones (3.31), (3.32 a, b) divididas por el volumen:

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} = -divq$$
(3.33)

La ley de Fourier de la conducción de calor relaciona el flujo de calor con el gradiente local de temperatura de la siguiente forma:

$$q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x}$$
 $q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y}$ $q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z}$

$$(3.34)$$

lo cual también se puede escribir en forma vectorial:

Combinando las ecuaciones (3.33) y (3.34 a) se puede escribir la forma final de la tasa de adición de calor sobre una partícula fluida debido a la conducción de calor:

$$-divq = div(kgradT)$$
(3.35)

Se ha denotado la energía especificada en un fluido como E. La energía de un fluido esta definida como la suma de la energía (térmica) interna *i*, energía cinética:

$$\frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$$
(3.36)

y energía potencial gravitacional.

Para la energía también se puede definir un término fuerte SE por unidad de volumen por unidad de tiempo. La ecuación de conservación de la energía en un volumen fluido establece la igualdad entre la tasa del cambio de la energía en el volumen y la suma de trabajo neto realizado sobre el volumen, la tasa neta de adición de calor y la tasa de variación de energía debido a las fuentes. La ecuación de energía se escribe entonces de la siguiente forma:

$$\rho \frac{DE}{Dt} = -div(pu) + \begin{bmatrix} \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\ + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \\ + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \end{bmatrix} + div(kgradT) + S_E$$

$$(3.37)$$

Es común extraer el cambio de la energía cinética mecánica para obtener una ecuación para la energía interna *i* o para la temperatura T. La parte de la ecuación de la energía que se atribuye a la energía cinética puede encontrarse multiplicando el componente *x* de la ecuación de momentum (3.11) por la componente *u* de la velocidad, la ecuación del momentum en *y* (3.12) por *v* y la ecuación de momentum en *z* (3.13) por *w*, luego se suman y se acoplan para obtener la ecuación:

$$\rho \frac{D\left[\frac{1}{2}\left(u^{2}+v^{2}+w^{2}\right)\right]}{Dt} = -u.gradp + u\left(\frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z}\right) + v\left(\frac{\partial\tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial\tau_{zy}}{\partial z}\right) + w\left(\frac{\partial\tau_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{yz}}{\partial y}+\frac{\partial\tau_{zz}}{\partial z}\right) + u.S_{M}$$

$$(3.38)$$

Sustrayendo la ecuación (3.37) de la ecuación (3.38) y definiendo un nuevo término fuerte como se llega a la ecuación de la energía interna:

$$\rho \frac{Di}{Dt} = -pdivu + div(kgradT) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + S_i$$
(3.39)

Si utilizamos el modelo newtoniano para tensiones viscosas en la ecuación de la energía (3.39) se obtiene después de un reordenamiento:

$$\rho \frac{Di}{Dt} = -p \ div \ \mathbf{u} + div(k \ grad \ T) + \Phi + S_i$$
(3.40)

Todos los efectos debidos a las tensiones viscosas en esta ecuación de la energía interna se describen por la disipación de Φ función que, después de un proceso algebraico considerable, se puede demostrar que es igual a:

$$\Phi = \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right\} + \lambda (div \mathbf{u})^2$$
(3.41)

Para un fluido incompresible se tiene que i=cT donde c es el calor especifico a volumen constante y divu=0, esto convierte la ecuación anterior en una ecuación para la temperatura en la siguiente forma:

$$\rho c \frac{DT}{Dt} = div(kgradT) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + S_i$$
(3.42)

El movimiento de un fluido en tres dimensiones es descrito por un sistema de cinco ecuaciones en derivadas parciales (tabla 7): una de conservación de masa (3.3 a), tres ecuaciones de cantidad de movimiento (3.21), (3.22), (3.23) y una ecuación de energía (3.40). Entre las incógnitas son siete variables: ρ , *p*, *i* y T, *u*, *v*, *w*. Para resolver el sistema la completamos con dos ecuaciones de estado.

Podemos describir el estado de una sustancia en equilibrio termodinámico a través de dos variables de estado. Si usamos p y T como variables de estado las ecuaciones de estado para la presión p y para la energía son:

$$p = p(\rho, T)$$
 y $i = i(\rho, T)$

Para gases perfectos:

$$p = \rho RT \quad \text{y} \quad i = C_{\nu}T$$
(3.43) (3.44)

Los líquidos y los gases que fluyen a bajas velocidades se comportan como fluidos incompresibles. Sin variaciones de densidad no existe un vínculo entre la ecuación de la energía y la conservación de la masa y el momento. Y el flujo a menudo se puede resolver teniendo en cuenta la conservación de masa y ecuaciones de momento solamente. La ecuación de la energía sólo hay que resolver junto con los demás si el problema consiste en la transferencia de calor.

Mass	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + di \nu(\rho \mathbf{u}) = 0$
x-momentum	$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + div(\rho u \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + div(\mu \ grad \ u) + S_{Mx}$
y-momentum	$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + div(\rho v \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + div(\mu \ grad \ v) + S_{My}$
z-momentum	$rac{\partial(ho w)}{\partial t} + div(ho w \mathbf{u}) = -rac{\partial p}{\partial z} + div(\mu \ grad \ w) + S_{Mz}$
Internal energy	$\frac{\partial(\rho i)}{\partial t} + div(\rho i\mathbf{u}) = -p \ div \ \mathbf{u} + div(k \ grad \ T) + \Phi + S_i$
Equations of state	$p = p(\rho, T)$ and $i = i(\rho, T)$
	e.g. perfect gas
	$p = \rho RT$ and $i = C_v T$

Tabla 7. Ecuaciones de conservación.

De las ecuaciones anteriores es claro que hay significativas semejanzas entre varias ecuaciones. Si introducimos una variable general φ , la forma conservativa de todas las ecuaciones de flujo de fluidos, incluyendo las ecuaciones para cantidades escalares tales como la temperatura, concentración de contaminante, entre otras, pueden ser escritas de la siguiente forma:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + div(\rho\phi\mathbf{u}) = div(\Gamma \text{ grad } \phi) + S_{\phi}$$
(3.45)

La conservación de una variable de flujo general φ , por ejemplo un componente de la velocidad o la entalpía dentro del volumen de control finito, puede ser expresada como un balance entre varios procesos tendientes a incrementarlo o disminuirlo:

 $\begin{bmatrix} velocidad & de \ cambio & de \ \phi \\ en \ el \ volumen & de \ control \\ con \ respecto & al \ tiempo \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} flux \ neto & de \ \phi \ debido & a \\ la \ convección & dentro & del \\ volumen & de \ control \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} flux \ neto & debido & a \ la \\ difusión \ dentro & del \ volumen \\ de \ control \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} flux \ neto \ debido & a \ la \\ difusión \ dentro \ del \ volumen \\ de \ control \end{bmatrix}$

La Ecuación (3.45) es usada como el punto de partida para los procedimientos computacionales en el método de volúmenes finitos. Ajustando φ igual a 1, *u*, *v*, *w* y *i* (ó T ó ho) y seleccionando los valores apropiados para el coeficiente de difusión Γ y los términos fuente, obtenemos formas especiales de la tabla 7 para cada una de las ecuaciones parciales: masa, momento, y conservación de energía.

3.4.3. Modelos de turbulencia [15]

El número de Reynolds Re de un flujo da una medida de la importancia relativa de las fuerzas de inercia, asociadas con los efectos convectivos, y las fuerzas viscosas. En experimentos con fluidos se observa que para valores inferiores a un número de Reynolds denominado crítico (Re<2000), el flujo es intrínsecamente estable y las capas de fluido adyacentes se deslizan unas sobre otras de forma ordenada. El régimen del flujo se denomina "laminar".

Si el flujo tiene un valor del número de Reynolds por encima del denominado crítico (Re > 4000), se manifiestan en éste unas perturbaciones que dan lugar a un cambio radical del carácter del flujo. El movimiento se vuelve intrínsecamente no estacionario, incluso con condiciones de contorno constantes. Este régimen se denomina flujo turbulento.

La turbulencia se define como el estado de movimiento de un fluido en el que las distintas variables relevantes (presión, velocidad, etc.) fluctúan de una forma desordenada. Se trata de un estado no estacionario desde el punto de vista macroscópico en el que las distintas variables adoptan valores dependientes tanto de la posición como del tiempo y estos valores varían de una forma aleatoria y desordenada.

El flujo turbulento contiene zonas con vórtices de diferentes tamaños. Los vórtices de grandes escalas extraen energía del flujo y la transfieren a los vórtices de menores escalas, donde la energía es disipada en forma de calor debido a la viscosidad.

La descripción del movimiento de las partículas fluidas debido al efecto de la turbulencia resulta altamente complejo y constituye un problema aún sin solución desde el punto de vista de los métodos numéricos. Se han propuesto varias formas de resolver el problema utilizando distintas aproximaciones. A continuación se exponen los métodos conocidos como simulación numérica directa, simulación de los grandes vórtices y promediado temporal de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Simulación directa de las ecuaciones ("Direct Numerical Simulation", DNS).

Este método (cuyas iniciales provienen de la denominación inglesa Direct Numerical Simulation) consiste, en realidad, en no utilizar ningún modelo para la turbulencia, sino realizar discretizaciones temporales y espaciales que sean capaces de simular el flujo en un determinado problema.

El método DNS resuelve las ecuaciones completas de Navier-Stokes sin ningun modelo para el movimiento turbulento, ya que todas las escalas de la turbulencia son determinadas explícitamente. Este modelo tiene como limitación el gran tiempo de cómputo necesario para su resolución, lo que restringe su uso a estudios muy simples de carácter académico.

Simulación de grandes vórtices ("Large Eddy Simulation", LES).

La técnica LES resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes después de aplicar un filtrado espacial, lo que es similar a realizar un promedio en el tiempo. Dependiendo de la anchura del filtro, que es generalmente una función del tamaño de la rejilla numérica empleada, LES puede capturar las fluctaciones más importantes en gran escala de las cantidades del flujo (explícitamente), dejando solamente las escalas relativamente pequeñas para modelarse empíricamente (modelado utilizando un modelo de subrejilla). Cuanto más fino es el tamaño de la rejilla, mejor es la resolución de las escalas de turbulencia.

Ecuaciones promediadas de Navier-Stokes, RANS

La aproximación tipo RANS es conocida en ingles como Reynolds averaget Navier-Stokes, lo cual se traduce "ecuaciones de Navier-Stokes promediadas temporalmente", han sido muy estudiados y resultan bastante útiles en la mayoría de los problemas prácticos resueltos mediante técnicas numéricas.

El punto de partida es muy sencillo. Se trata de obtener una descomposición de las variables en su valor medio y su valor fluctuante. Por ejemplo, para la velocidad, la descomposición sería:

$$U = \overline{U} + u'$$
(3.46)

donde el componente medio de la velocidad se obtiene haciendo la integral de la velocidad instantánea:

$$\overline{U} = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} U dt \qquad (3.47)$$

donde T es el tiempo promediado de la simulación, usualmente grande comparado con escala de tiempo de fluctuación turbulenta, u'es el componente fluctuante.

Sustituyendo (3.46) en la ecuación de momento, se obtienen las ecuaciones promediadas de Navier-Stokes,

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \overline{u_i u_j} \right)$$
(3.48)

donde ρ , p, y v representan la densidad, la presión y la viscosidad cinemática del fluido respectivamente.

Las ecuaciones promediadas de Navier-Stokes presentan el término desconocido:

$\overline{u_i u_j}$

el cual es la correlación entre las componentes de fluctuación de la velocidad y se le conoce como "el término de los esfuerzos de Reynolds". La existencia de los esfuerzos de Reynolds implica que se deben hacer suposiciones sobre su estructura para dar solución al problema de turbulencia.

Los modelos RANS han sido desarrollados en base al concepto de que la escala de velocidad y la escala de longitud son suficientes para describir el efecto de la turbulencia de flujo. En instancias iniciales el modelo de turbulencia utilizado era el modeo de viscosidad turbulenta el cual realiza una estimación de las escalas de velocidad y longitud del flujo por medio de los valores locales. Esto se lleva a cabo relacionando la viscosidad turbulenta con el gradiente de velocidad de flujo. Pero este simple modelo isentrópico no simula bien los flujos de mayor complejidad.

Los modelos clásicos de dos ecuaciones como k-e son actualmente los más utilizados. Estos se basan en la presunción de que existe una analogía entre la acción de los esfuerzos viscosos y los esfuerzos de Reynolds en el flujo.

Ambos esfuerzos aparecen en el lado derecho de la ecuación del momentum. En la ley de la viscosidad de Newton el esfuerzo viscoso es proporcional a la tasa de deformación de los elementos fluidos. Para un fluido incompresible se verifica

$$\tau_{ij} = \mu e_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$
(3.49)

Con el fin de simplificar la notación se utilizan los subíndices i y j. La convención de esta notación es que i o j=1, corresponde a la dirección x, i o j=2 a la dirección y, y la dirección z a i o j=3.

Experimentalmente se observa que la turbulencia decae a menos que exista un esfuerzo cortante en el flujo incompresible isotermo. Por otra parte, se encuentra que el esfuerzo turbulento aumenta conforme aumenta la tasa de la deformación. Boussinesq en 1877 propuso que el esfuerzo de Reynolds se puede asociar a las tasas de deformación. Usando la nomenclatura de subíndices se escribe:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$
(3.50)

El transporte turbulento de calor, masa y otras propiedades escalares se estiman de igual forma. La ecuación anterior muestra que el momentum de transporte turbulento es proporcional a los gradientes de velocidad (gradientes del momentum por unidad de masa). Análogamente el transporte turbulento del escalar se toma proporcional a los gradientes de la cantidad transportada, en notación de subíndices da como resultado:

$$-\overline{\rho u_{i}' \varphi} = \Gamma_{t} \frac{\partial \Phi}{\partial x_{i}}$$
(3.51)

donde Γt es la difusividad turbulenta. Cuando se mezclan los remolinos, se espera de alguna forma que los valores de la difusividad turbulenta Γt sean cercanos al valor de la viscosidad turbulenta μt , por esta razón se incluye el número de Prandtl/Schmidt:

$$\sigma_t = \frac{\mu_t}{\Gamma_t}$$

como:

Continuity

$$\begin{array}{c}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \mathbf{U}) = 0 \\
\text{Reynolds equations} \\
\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + div(\rho U \mathbf{U}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + div(\mu \ grad \ U) + \left[-\frac{\partial(\rho u'')}{\partial x} - \frac{\partial(\rho u''v)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho u''v)}{\partial z} + S_{Mx} \right] \\
\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + div(\rho V \mathbf{U}) = -\frac{\partial P}{\partial y} + div(\mu \ grad \ V) + \left[-\frac{\partial(\rho u'v)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v'v)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v'v)}{\partial z} + S_{My} \right] \\
\frac{\partial(\rho W)}{\partial t} + div(\rho W \mathbf{U}) = -\frac{\partial P}{\partial z} + div(\mu \ grad \ W) + \left[-\frac{\partial(\rho u'v)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v'v)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v'v)}{\partial z} + S_{Mz} \right] \\
\frac{\partial(\rho \Phi)}{\partial t} + div(\rho \Phi \mathbf{U}) = div(\Gamma_{\Phi} \ grad \ \Phi) + \left[-\frac{\partial(\rho u'v)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v'v)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho w'v)}{\partial z} + S_{\Phi} \right] \\
\end{array}$$
(3.52 a)
(3.52 a)
(3.52 a)

Tabla 8. Ecuaciones promediadas de Navier-Stokes, RANS

Al hacer el promediado en el tiempo se introducen 6 nuevas incógnitas (los esfuerzos de Reynolds: 3 normales y 3 de cizalladura). Similarmente, en las ecuaciones de transporte escalar aparecen nuevos términos extra (en círculos en las ecuaciones anteriores), conocidos como "Fluxes de Reynolds" o "Fluxes Turbulentos". Ahora tenemos siete ecuaciones (una de continuidad, tres de momento, una de energía y dos de estado) y trece incógnitas: tres para la velocidad media, una para la presión media, una para densidad media, una para la energía media, una para la temperatura media y seis para el tensor de tensiones de Reynolds (3.53), ya que por ser este último simétrico solo seis de sus nueve componentes son distintos.

El tensor de los esfuerzos de Reynolds:

$$\boldsymbol{\tau}_{ij} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\tau}_{xx} \boldsymbol{\tau}_{xy} \boldsymbol{\tau}_{xz} \\ \boldsymbol{\tau}_{yx} \boldsymbol{\tau}_{yy} \boldsymbol{\tau}_{yz} \\ \boldsymbol{\tau}_{zx} \boldsymbol{\tau}_{zy} \boldsymbol{\tau}_{zz} \end{pmatrix}$$
(3.53)

donde

$$\tau_{xx} = -\rho \overline{u'^2} \qquad \tau_{yy} = -\rho \overline{v'^2} \qquad \tau_{zz} = -\rho \overline{w'^2} \tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'} \qquad \tau_{xz} = \tau_{zx} = -\rho \overline{u'w'} \qquad \tau_{yz} = \tau_{zy} = -\rho \overline{v'w'}$$

Entonces, la tarea principal del modelado de la turbulencia es encontrar procedimientos computacionales que permitan encontrar con suficiente exactitud y generalidad para los ingenieros los Esfuerzos de Reynolds y Fluxes de Reynolds.

Para propósitos de ingeniería no es necesario resolver los detalles de las fluctuaciones turbulentas sino solo los efectos de la turbulencia sobre el flujo promedio, para ello tenemos los siguientes modelos clásicos:

- Modelo de una ecuación: modelo k.
- Modelo de dos ecuaciones: modelos k- ϵ , k- ω 2 o q- ω , modelo RNG.

Para este trabajo se seleccionó el modelo k- ε por su robustez y porque en comparación con otros modelos del tipo RANS, es el que menos tiempo de cálculo por iteración requiere.

Modelo de turbulencia RANS k-e

Este modelo de turbulencia se centra básicamente en el mecanismo que afecta directamente la energía turbulenta.

Algunos términos preliminares se deben tener en cuenta. La energía cinética instantánea k(t) de un flujo turbulento es la suma de la energía cinética promedio

$$K = \frac{1}{2} \left(U^2 + V^2 + W^2 \right)$$
(3.54)

y la energía cinética turbulenta por unidad de masa se define a partir de la velocidad fluctuante:

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u^{2}} + \overline{v^{2}} + \overline{w^{2}} \right)$$
(3.55)

$$k_{(t)} = K + k$$
 (3.56)

En las demostraciones realizadas a continuación se requiere utilizar la tasa de deformación y los esfuerzos turbulentos. Para facilitar la subsecuencia de la cálculos es muy común escribir los componentes de la tasa de deformación e_{ii} en forma de tensor:

$$\boldsymbol{e}_{ij} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_{xx} \boldsymbol{e}_{xy} \boldsymbol{e}_{xz} \\ \boldsymbol{e}_{yx} \boldsymbol{e}_{yy} \boldsymbol{e}_{yz} \\ \boldsymbol{e}_{zx} \boldsymbol{e}_{zy} \boldsymbol{e}_{zz} \end{pmatrix}$$
(3.57)

)

Descomponiendo la tasa de deformación de un elemento fluido en una componente promedio y fluctuante,

$$e_{ij}(t) = E_{ij} + e_{ij}$$

resulta la siguiente matriz:

$$e_{xx}(t) = E_{xx} + e'_{xx} = \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x}$$
$$e_{yy}(t) = E_{yy} + e'_{yy} = \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial y}$$
$$e_{zz}(t) = E_{zz} + e'_{zz} = \frac{\partial W}{\partial z} + \frac{\partial w'}{\partial z}$$

$$e_{xy}(t) = E_{xy} + e_{xy} = e_{yx}(t) = E_{yx} + e_{yx} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]$$

$$e_{xz}(t) = E_{xz} + e_{xz} = e_{zx}(t) = E_{zx} + e_{zx} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial W}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right]$$

$$e_{yz}(t) = E_{yz} + e_{yz} = e_{zy}(t) = E_{zy} + e_{zy} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial V}{\partial z} + \frac{\partial W}{\partial y} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right]$$

Ecuación para la energía cinética promedio K del flujo

La ecuación para la energía cinética promedio puede obtenerse multiplicando el componente x de la ecuación del momentum promediadas temporalmente (4.11) por U, la componente y de la ecuación (4.12) por V y la componente z de la ecuación (4.13) por W. Luego de sumar los resultados y agruparlos y aplicando el álgebra se puede llegar a que la ecuación promediada de la energía cinética de flujo es de la siguiente forma:

$\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} +$	$div(\rho KU) =$	$div \left(-PU + V\right)$	+ 2 <i>µUE_{ij} -</i>	$-\rho U\overline{u_i^{'}u_j^{'}}$	$-2\mu E_{ij}E_{ij}$	$+\rho \overline{u_i'u_j'}E_{ij}$
$\subseteq \mathcal{A}$	${ \searrow}^{\!$	${ \ } \smile $	${ \ } \smile$	${ \ } \smile $	${ \ } \smile $	${}^{\!$
I	Ш	Ш	IV	V	VI	VII
						(3.58)

En otros términos el significado de cada uno de los términos anteriormente escritos es el siguiente:

Tasa de	Transporte de	+ Transporte de +	Transporte de
1454 40	indisponde de	- manoporto do -	i lanoporto do
cambio de K	K nor la presión	K nor los esfuerzos	K nor los esfuerzos
cambio de K	it por la presion	it por los esideizos	R por los esideizos
L 1	-	cortantes	de Revnolds
- T	-	contantes	ue neynolus
Transnorte de	- Tasa da disina	ción 🛨 Producción de	
Transporte de	- Tasa ue uisipa		
K nor convección	do K	Turbulencia	
R por conveccion	uert	Turbulericia	

Los términos de transporte (III), (IV) y (V) se caracterizan por la aparición del operador div. El efecto de los esfuerzos viscosos sobre K ha sido divididos en dos partes, el termino (IV), el transporte de K por los esfuerzos viscosos y el término (VI) es la disipación viscosa de la energía cinética K. Los dos términos que contienen los esfuerzos de Reynolds



se deben a los efectos turbulentos: el término (V) es el transporte turbulento de K debido a los esfuerzos de Reynolds y el término (VII) es la producción turbulenta de K debido al trabajo de deformación debido a los esfuerzos de Reynolds. Para números de Reynolds altos los términos turbulentos (V) y (VII) son mucho mayores que las contribuciones viscosas (IV) y (VI).

Ecuación para la energía cinética turbulenta k

Multiplicando cada una de las ecuaciones de Navier-Stokes sin los esfuerzos de Reynolds por su componente de fluctuación de la velocidad (el componente *x* se multiplica por u' etc.) y sumando los resultados, seguido de una repetición de este proceso con las ecuaciones de Reynolds, restando las dos ecuaciones resultantes y re ordenando se llega a la siguiente ecuación para la energía cinética turbulenta k:



En otros términos el significado de cada uno de los términos anteriormente escrito es el siguiente:

Tasa de	Transporte de	+ Transporte de	+ Transporte de
cambio de k	k por la presión	k por los esfuerzos	k por los esfuerzos
+	=	cortantes	de Reynolds
Transporte de	- Tasa de disipad	ción + Producción de	
k por convección	de k	Turbulencia	

Las ecuaciones (3.58) y (3.59) parecen muy similares en muchos aspectos, a pesar que los términos cuantitativos del lado derecho de la ecuación muestran que el cambio de la energía cinética turbulenta viene determinado por las interacciones turbulentas. El término (VII) en ambas ecuaciones es igual en magnitud, pero opuesto en signo. El término (VII) proporciona una contribución positiva en la ecuación k y representa un término de producción. En la ecuación K representa una destrucción de la energía cinética. Esto expresa matemáticamente la transferencia de la energía cinética promedio a energía cinética turbulenta.

El término (VI) es la disipación debido a la viscosidad

$$-2\mu \overline{e_{ij}^{'2} e_{ij}^{'2}} = -2\mu \left(\overline{e_{11}^{'2}} + \overline{e_{22}^{'2}} + \overline{e_{33}^{'2}} + \overline{e_{12}^{'2}} + \overline{e_{13}^{'2}} + \overline{e_{23}^{'2}} \right)$$
(3.60)

y proporciona una contribución negativa a la ecuación (3.59) debido a la aparición de la suma de cuadrados de la tasa de deformación fluctuante *eij*. La disipación de la energía cinética turbulenta es debida al trabajo realizado por los vórtices de pequeñas escalas sobre los esfuerzos viscosos. La tasa de disipación por unidad de masa, cuyas dimensiones son m²/s³ es de vital importancia para el estudio de dinámica turbulenta y se denota como:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = 2v \overline{\boldsymbol{e}_{ij}} \boldsymbol{e}_{ij}$$
(3.61)

)

Éste es el término de destrucción de la energía cinética turbulenta, el cual es de un orden de magnitud similar al término de producción. En contraste, cuando se tiene un número de Reynolds alto, el término de transporte viscoso (IV) en la ecuación (3.59) es siempre mucho mas pequeño comparado con el término de disipación turbulenta (VI).

Es posible desarrollar una ecuación de transporte similar para todas las otras variables turbulentas incluyendo la tasa de la disipación viscosa ε . La ecuación ε contiene términos desconocidos y que son difícilmente medibles.

La ecuación estándar para el modelo k- ε , tiene dos ecuaciones modelo, una para k y otra para ε . Se usa k para definir el valor de la escala de la velocidad, v, y ε para el valor de la escala de longitud, l respectivamente, representando la mayor escala de la turbulencia, de la siguiente forma:

$$\vartheta = k^{1/2}$$
 $\ell = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$

La viscosidad turbulenta se escribe de la siguiente forma:

$$\mu_{t} = C\rho \vartheta \ell = \rho C_{\mu} \frac{k^{2}}{\varepsilon}$$
(3.62)

donde $C\mu$ es una constante a dimensional.

El modelo estándar k- ε , utiliza las siguientes ecuaciones de transporte:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + div(\rho kU) = div\left[\frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}}grad(k)\right] + 2\mu_{t}E_{ij}E_{ij} - \rho\varepsilon$$

$$(3.63)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + div(\rho\varepsilon U) = div\left[\frac{\mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}}grad(\varepsilon)\right] + C_{i\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}2\mu_{t}E_{ij}E_{ij} - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^{2}}{k}$$

$$(3.64)$$

En otros términos el significado de las ecuaciones es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} \text{Velocidad de} \\ \text{cambio de k/} \epsilon \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Transporte de k/} \epsilon \\ \text{por convección} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Transporte de k/} \epsilon \\ \text{por difusión} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Producción} \\ \text{de k/} \epsilon \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Destrucción} \\ \text{de k/} \epsilon \end{bmatrix}$$

La constantes $C_{\varepsilon l}$, $C_{\varepsilon 2}$ **y** C_{μ} son obtenidas de condiciones experimentales, usualmente los valores de estas constantes tabl. son:

c_{μ}	$c_{1arepsilon}$	$c_{2\varepsilon}$	σ_k	σ_{ε}
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Tabla 9. Coeficientes constantes. Modelo k-E.

A partir del modelo, los esfuerzos de Reynolds se calculan como:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} = 2\mu_t E_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}$$
(3.66)

Donde δ_{ii} es el tensor delta – Kronecker:

$$\delta_{ij} = 1 \text{ si } i = j$$
$$\delta_{ij} = 0 \text{ si } i \neq j$$

Las ecuaciones para k y ε se emplean para determinar la viscosidad turbulenta (fórmula 3.62), a partir de la cual se calculan los esfuerzos de Reynolds (fórmula 3.66), que posteriormente se reemplazan en las ecuaciones promediadas de Navier-Stokes, que junto con la ecuación de continuidad forman el sistema de ecuaciones que compone el método.

Las principales ventajas e inconvenientes de este modelo son las siguientes:

Ventajas:

- Sólo se necesita fijar las condiciones iniciales y de contorno.
- Resultados satisfactorios para una gran cantidad de flujos.

• Es el modelo turbulento más ampliamente utilizado en la mayoría de flujos en aplicaciones industriales.

• Se dispone de leyes de pared desarrolladas como condiciones de contorno para este tipo de modelos.

Inconvenientes:

• Implementación más compleja que los modelos algebraicos debido a la introducción de dos ecuaciones diferenciales adicionales.

• Pobres resultados en casos como: flujos no confinados, flujos con grandes gradientes longitudinales, flujos turbulentos completamente desarrollados en conductos no circulares.

3.4.4. Las ecuaciones de conservación de especies [4], [1]

Las ecuaciones de Navier-Stokes para los flujos con reacción química se diferencian de las ecuaciones para los flujos habituales en tres aspectos principales:

El fluido reactante es una mezcla no isotérmica de múltiples especies (hidrocarburos, oxígeno, agua, dióxido de carbono, etc.) que deben ser seguidos de forma individual. Los datos termodinámicos también son más complejos que en la aerodinámica clásica, porque la capacidad calorífica del gas reaccionado cambia significativamente con la temperatura y composición.

La velocidad de reacción química requiere de modelación específica.

Puesto que el fluido es una mezcla de gases, los coeficientes de transporte (difusividad calorífica, difusión de especies, viscosidad, etc.) requieren una atención especial.

La combustión consiste en las reacciones múltiples de especies químicas, y las ecuaciones de Navier-Stokes tienen que incluir algunos términos adicionales que consideran las propiedades de los componentes que constituyen la mezcla, que determinan las propiedades del fluido.

En primer lugar las mezclas se caracterizan por la composición fraccional [1].

Sea una mezcla de *i* gases de los cuales, en un volumen de control V haya *ni* moles de cada uno. Definimos la fracción molar:

$$x_i = \frac{n_i}{\sum n_i} = \frac{n_i}{n}$$
(3.67)

Si las masas moleculares de los gases son Wi, definimos la fracción de masa

$$y_i = \frac{n_i W_i}{\sum n_i W_i} = \frac{m_i}{m}$$
(3.68)

)

)

donde m_i es la masa de especie i y m es la cantidad de masa total en el volumen de control.

De las expresiones anteriores:

$$y_i = x_i \frac{W_i}{W}$$
(3.69)

Luego, como por definición

$$\sum x_i = \sum y_i = 1$$

resulta:

$$\frac{1}{W} = \sum \frac{y_i}{W_i} \tag{3.70}$$

$$W = \sum x_i W_i \tag{3.71}$$

Las expresiones anteriores nos permiten calcular la composición fraccional en peso (y_i) y en volumen (x_i) de la mezcla, así como el número de moles *n* y la masa molecular de la mezcla W.

La presión parcial se relaciona con la densidad parcial de cada componente de la mezcla por:

$$\boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{\rho}_i \, \frac{\boldsymbol{\Re}}{\boldsymbol{W}_i} \, \boldsymbol{T}$$
(3.72)

siendo

$$\rho_i = m_i / V$$

luego, como $x_i = p_i / p$ y $p = \rho \frac{\Re}{W} T$

resulta:

$$\boldsymbol{\rho} = \sum \boldsymbol{\rho}_i \boldsymbol{y}_i \tag{3.73}$$

Donde, T es la temperatura, R=8.314 J/(moleK) es la constante de gas perfecto

Las variables primitivas de un flujo tridimensional reactante y compresible son:

- La densidad $\rho = m / V$.
- El campo de velocidades, en tres dimensiones ui
- Una variable de la energía (presión, entalpía o temperatura T).
- Las fracciones de masa Yk para N especies reactantes.

La ecuación (3.73) es remplazada a la ecuación de conservación de masa y ésta se resuelve para cada componente del fluido.

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{k})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{k}) = \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left[\overline{V_{k,i}Y_{k}} - \overline{\rho}\left(\widetilde{u_{i}Y_{k}} - \widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{k}\right)\right] + S_{I} \quad k = 1, N$$

$$(3.74)$$

donde el término fuente SI representa una fuente / sumidero, debido a las reacciones químicas.

En general, las reacciones químicas se pueden describir en términos de las reacciones elementales K relacionadas con componentes N*c* que se puede escribir como:



donde vkI es el coeficiente estequiométrico para el componente I de la reacción elemental k y Nc es el número de componentes.

La tasa de producción/consumo, SI, para el componente I puede ser calculado como la suma de la tasa de progreso para todas las reacciones elementales en los que participa componente I:

$$S_{I} = W_{I} \sum_{k=1}^{K} (v_{kI}^{''} - v_{kI}^{'}) R_{k}$$
(3.76)

donde Rk es la velocidad de reacción elemental de progreso para la reacción, que en ANSYS CFX se puede calcular mediante el modelo de Eddy Dissipation y/o el modelo Finite Rate Chemistry.

3.4.5. Modelo de combustión

Simular el proceso de combustión demanda la inclusión de un mecanismo cinético que represente razonablemente el proceso que se quiere abordar numéricamente, a su vez, los mecanismos cinéticos se dividen en dos grandes grupos: Mecanismos Globales y Mecanismos Detallados.

Un mecanismo cinético global, consigue reproducir informaciones generales del proceso de combustión, mientras que un mecanismo cinético detallado consigue reproducir particularidades del proceso de combustión. Esta diferencia es función del número de especies y reacciones químicas contempladas en los dos tipos de mecanismos. Una mayor cantidad de especies químicas contempladas en un mecanismo cinético va a permitir colectar una mayor cantidad de información que, dependiendo del proceso en análisis, pueden ser de gran impacto. No siempre es posible realizar una simulación en CFD usando un mecanismo cinético detallado de grandes proporciones. El problema radica en el número de especies químicas que han de tenerse en cuenta en la simulación. Por ejemplo, querer simular un proceso de combustión en CFD tridimensional, no estacionario, turbulento es imposible con los recursos computacionales actuales. Por esto es común en simulaciones CFD de combustión, usar mecanismos cinéticos globales o reducidos, que sean posibles de implementar en los recursos computacionales actuales.

Son diversos los métodos, con enfoque numérico, para abordar problemas de combustión. Diferentes programas CFD tienen inplementadas varias metodologías para abordar la solución numérica de un proceso de combustión. Estas metodologías envuelven el transporte de alguna variable y a partir de allí, surgen los diferentes modelos: a). Eddy Dissipation Model, adecuado para las reacciones rápidas; b) Finite Rate Chemistry Model, adecuado para reacciones más lentas Individuales y las reacciones de varios pasos c) Combinación de los métodos a y b; d) Laminar Flamelet Model, propicio para las llamas de difusión (la reacción sólo se produce en la superficie de la llama), e) NOx y Soot modelos.

En este trabajo se utilizó el modelo de combustión Eddy Dissipation, usando el mecanismo de reacción de un paso (single one-step), que postula que la combustión se produce mediante la reacción irreversible:

Combustible+Oxidante=Productos

Donde los productos que se forman son CO₂ y H₂O.

Para el butano $C_4 H_{10}$ la reacción de combustión completa estequiométrica:

$$C_4H_{10} + 6.5(O_2 + 3.762N_2) = 4CO_2 + 5H_2O + 24.453N_2 \quad (3.77)$$

El modelo de Eddy Dissipation se basa en el concepto de que la reacción química es rápida en relación con los procesos de transporte en el flujo. Cuando se mezclan los reactivos a nivel molecular, instantáneamente se forman productos. El modelo asume que la velocidad de reacción puede estar relacionada directamente con el tiempo necesario para la mezcla de reactivos a nivel molecular. En flujos turbulentos, la velocidad es proporcional al tiempo de mezcla y se define por la energía cinética turbulenta, k, y la disipación, ε .

En el modelo de Eddy Disipation, el ritmo de avance de la reacción elemental k, está determinado por la menor de las dos expresiones siguientes:

Limitador de reactivos[.]

$$R_{k} = A \frac{\varepsilon}{k} min\left(\frac{[I]}{v_{kI}}\right)$$
(3.78)

donde [I] es la concentración molar del componente I y sólo se incluyen los componentes del reactivo.

Limitador de productos:

$$R_{k} = AB \frac{\varepsilon}{\bar{k}} \left(\frac{\sum_{p} [I] W_{I}}{\sum_{p} \tilde{\upsilon_{kI}} W_{I}} \right)$$

$$(3.79)$$

donde P iteraciones sobre todos los productos de los componentes en la reacción primaria k. El limitador de productos se desactiva cuando el modelo B coeficiente se establece en un valor negativo. Por tanto solo el paso y los esquemas multi-paso de la reacción, que está desactivada por defecto, (se establece en -1), pero puede ser activada por establecer explícitamente el coeficiente B modelo para un valor positivo (aunque esto no se recomienda para los sistemas de reacción de varios pasos). Al coeficiente A se asigna el valor 4. El modelo Eddy Disipation se utiliza para la combustión premezclada pero asignando el valor 0.5 a la constante B se activa la ecuación de limitador de productos y el modelo puede ser usado para la combustión parcialmente premezclada. En este caso es necesario seleccionar los valores iniciales diferentes de cero para los productos. El limitador de productos no se recomienda para las reacciones de varios pasos. [13a].

3.4.6. Modelo de radiación [4]

La radiación es la energía emitida por la materia en la forma de ondas electromagnéticas (o fotones), como resultado de los cambios en la configuraciones electrónicas de los átomos o moléculas. A diferencia de la conducción y la convección, la transferencia de energía por radiación no requiere la presencia de un medio interpuesto. De hecho la transferencia de energía por radiación es la más rápida (a la velocidad de la luz) y no sufre la atenuación en el vacío. De esta manera llega a la Tierra la energía del Sol. En nuestro estudio es de interés la radiación térmica, que es la forma de radiación emitida por los cuerpos debido a su temperatura. Es diferente de las otras formas de radiación, como los rayos X, los rayos gamma, las microondas, las ondas de radio y de televisión, que no están relacionadas con la temperatura. Todos los cuerpos a una temperatura arriba del cero absoluto emiten radiación térmica. La radiación es muy importante en las cámaras de combustión, donde las temperaturas son elevadas porque según la ley de Stefan-Boltzmann, la cantidad de energía emitida por radiación depende de la diferencia de las temperaturas absolutas elevada a la potencia cuatro (pag.28).

$$\dot{Q}_{\text{emit,max}} = \sigma A T_s^4$$
 (W) (3.80)

donde A-área de la superficie, σ - constante de Boltzmann,

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} W / m^2 \cdot K^4$$

 T_{s} - temperatura absoluta

En el horno el medio está constituido por una mezcla de gases, algunos de ellos participativos, a alta temperatura. Los gases absorben y emiten radiación térmica dependiente de la temperatura y de la longitud de onda.

Realizando un balance de la energía radiactiva a lo largo de una dirección s, el cambio de intensidad radiativa, se determina sumando las contribuciones correspondientes a la emisión, absorción, dispersión entrante en la dirección s y dispersión saliente en la dirección s, de forma que se obtiene una ecuación para la intensidad de la radiación.

$$\frac{dI_{\lambda}}{ds} = \varepsilon \cdot I_{b\lambda} - (k_a + k_s) \cdot I_{\lambda} + \frac{k_s}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda}(\hat{s}_i) \cdot \Phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s}) \cdot d\Omega_i$$

(3.81)

El cambio de	absorción y	+	dispersión
la intensidad = emisión -	dispersión entrante		saliente en la
radiactiva	en la dirección s		dirección s

Donde: ka - coeficiente de absorción espectral, ks - coeficiente de dispersión, ε - emisividad espectral; $I_b \lambda$ - es la función de Planck, describe la intensidad de irradiación de cuerpo negro; $I\lambda$ - intensidad de la radiación espectral que depende de la posición (r) y dirección (s); ϕ - función dispersión de fase; Ω - ángulo sólido.

Por la ley de radiación de Kirchhoff, la emisividad espectral $\varepsilon(\lambda)$ y el coeficiente de absorción espectral $ka(\lambda)$ tomarán el mismo valor. Este valor se puede estimar aplicando un modelo de gases grises, descomponiendo el gas real, en uno claro y varios grises. Pero, para simplificar el problema y evaluar las propiedades del gas, se ha optado por un modelo de gas gris, con un valor de absortividad constante (ε =1) para todo el espectro de frecuencias.

De acuerdo con la ley de Planck, la intensidad de cuerpo negro I_b, se obtiene integrando en todo el espectro la intensidad en cada longitud de onda λ (Ecs. y).

$$I_{b}(T) = \int_{0}^{\infty} I_{b\lambda}(T) \cdot d\lambda = \sigma_{B} \cdot T^{4} \qquad \text{y} \qquad I_{b\lambda}(T) = \frac{C_{1}}{\lambda^{5} (e^{\frac{C_{1}}{2}/\lambda T} - 1)}$$
(3.82)

En cuanto a la dispersión, ésta se asume isótropa en todo el medio simplificándose así el último término de la ecuación de transporte de la intensidad de la radiación (Ec. 3.66)

$$\Phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s}) = 1$$

Es ecuación integro-diferencial de primer orden para I λ en dirección *s*, su resolución es es muy costosa computacionalmente. Para resolverla existen muchos modelos de radiación que proporcionan las soluciones aproximadas. [13] Entre los modelos de radiación más usados están:

• Modelo Rosseland (Modelo de Aproximación de Difusión).

• Modelo P1 (también conocido como el modelo Gibb's o Modelo de armónicos esféricos).

- Modelo de Transferencia Discreta (Modelo Shah).
- Modelo Monte Carlo.

La elección del modelo de radiación térmica afectará no sólo la calidad de la solución, sino también el tiempo de cómputo requerido. La selección adecuada debe hacerse a partir de consideraciones físicas. [12]. La aproximación al medio ópticamente delgado u ópticamente grueso es la más utilizada en la teoría de transmisión por radiación. En el primer caso la probabilidad de absorción de fotones en el volumen estudiado es muy pequeña y, en el segundo caso, muy grande. Esto significa que en el medio ópticamente delgado los fotones de radiación propia fácilmente abandonan el volumen y los fotones de la radiación exterior lo atraviesan sin resistencias. En el caso de aproximación al medio ópticamente grueso, al revés, los fotones de radiación propia y de la radiación exterior son absorbidos con el propio medio. Es importante resaltar que en el proceso de resolución de los problemas de radiación con frecuencia los medios son aproximados a uno de los dos casos.

Aproximación al medio ópticamente delgado.

$$\kappa_{\lambda}(S) = \int_0^S K_{\lambda}(S^*) dS^* \quad (3.84)$$

 k_{λ} - espesor óptico

$$k_{\lambda} = e^{-K_{\lambda}S}$$

 K_{λ} -coeficiente de absorción espectral; S-espesor del medio

En el medio ópticamente delgado, $k_{\lambda} \ll 1$ esto permite simplificar considerablemente las ecuaciones de la transferencia por radiación.

En aproximación al medio ópticamente grueso $k_{\lambda} \gg 1$ esta aproximación se llama "aproximación de Rosseland" o "de difusión".

Muchos de los flujos de fluidos de interés práctico se encuentran en situaciones donde el fluido y / o las paredes están calientes. En tales situaciones los efectos de la transferencia de calor radiante pueden llegar a ser importantes. Un ambiente típico donde la radiación juega un papel significativo es un horno o una cámara de combustión.

Un extremo es la situación en la que el medio es transparente a la radiación en longitudes de onda en la que se produce la mayoría de la transferencia de calor. En este caso, la radiación sólo afecta al medio por el calentamiento o enfriamiento de las superficies del dominio, sin la transferencia de energía radiante directamente al medio. Para este caso se debe utilizar sólo el modelo Monte Carlo. El modelo de Transferencia Discreta también se ha utilizado en este caso, pero con éxito limitado. En el extremo opuesto está la situación en la que el medio es ópticamente denso y la radiación interactúa con el medio en el interior del dominio, así como en las superficies. Si el medio es ópticamente grueso, la energía radiante está bien dispersa o se absorbe y es reemitida en todas las direcciones con una escala de longitud pequeña en comparación con el tamaño del dominio. Esta situación se conoce como el "límite de la difusión", va que la intensidad de radiación es independiente de la dirección. En este caso, los modelos Rosseland y P1 son una alternativa mas atractiva que los modelos la Transferencia Discreta y Monte Carlo debido a su simplicidad. Para los casos generales, que van desde la óptica delgada (transparente) y ópticamente grueso (difusión), las regiones, como la combustión, los modelos de Transferencia Discreta y Monte Carlo representan la solución de la ecuación de transferencia radiactiva con mayor precisión.

[13]. En los problemas de difusión o medio ópticamente grueso, todos los modelos producen casi los mismos resultados. Entonces la mejor alternativa son los modelos Rosseland y P1. A medida que disminuye el espesor óptico y se acerca a 1, el modelo P1 se convierte en la alternativa menos costosa. Y, por último, en el medio ópticamente delgado y transparente sólo los modelos Monte Carlo y Transferencia Discreta debe ser utilizados.

Para los modelos con medios gris, el campo de radiación se espera que sea razonablemente homogéneo en todas partes (al menos a nivel local), y se requiere de alta resolución espacial, en este caso el método Transferencia Discreta es mucho más eficiente y proporciona resultados muy precisos si se utiliza suficiente resolución angular. Un problema importante con la transferencia discreta es la falta de información de error.

Modelo de radiación	Descripción	Método	Limitaciones	Beneficios	Ejemplos
Modelo Rosseland	Supone que los medios son ópticamente gruesos y que energía radiante emitida desde otros lugares en el dominio se absorbe rápidamente y no tienen influencia en el transporte local. Esto implica que la aproximación no es válida cerca de las paredes. La aproximación Rosseland es muy cómoda de usar ya que no resuelve ecuaciónes de transporte adicionales	a la ecuación de energía se añade un término de difusión.	sólo es válido para el material anisotrópico ópticamente grueso y de forma lineal (grosor / profundidad mayor de 10) Cerca de las paredes no es válida	no requiere condiciones de frontera ya que las superficies se tratan como negro (emisividad = 1.0)	Transferencia de calor a través del vidrio en caliente Transferencia de calor a través del material semitranspa- rente

1. Modelo Rosseland

Modelo de radiación	Descripción	Método	Limitaciones	Beneficios	Ejemplos
Modelo P1	se resuelve una ecuación de transporte adicional. -Hipotesis: Intensidad de radiación es isótropa o la dirección es independiente de la posición en el espacio	se resuelve una ecuación de transporte adicional, por lo tanto es más costosa	Sólo es válido para el espesor óptico / profundidad mayor que 1. No es válido para las paredes transparentes Las necesidades de condiciones de contorno en todas las superficies externas	Válido para las superficies no- negro, las propiedades no constantes, la dispersión anisotrópica, y cerca de las paredes	las llamas de combustible pulverizado (en las regiones fuera de las inmediacione s de la llama)

2.Modelo P1

Modelo de radiación	Descripción	Método	Limitaciones	Beneficios	Ejemplos
Modelo Monte Carlo	Simula los procesos subyacentes que gobiernan el sistema de interés, es decir, las interacciones físicas entre los fotones y su entorno. Un fotón es seleccionado desde una fuente de fotones y seguido a través del sistema hasta que cruza la frontera de la región analizada (la superficie S) o se choca con las partículas materiales del medio. Cada vez que el fotón experimenta un "evento", por ejemplo, la dispersión (en este caso el fotón continúa el movimiento en nueva dirección y con nueva energía) o la absorción (en este caso el "evento" se termina), las cantidades físicas de interés son actualizadas. Este proceso genera una "historia" de los fotones en el sistema. Muchas historias de fotones deben ser generados para o btener buenas estimaciones de las cantidades físicas de interés en un sistema. Las fuentes de fotones des nes estimaciones de las cantidades físicas de interés en un sistema. Las fuentes de fotones des nestimaciones de las cantidades físicas de interés en un sistema. Las fuentes de fotones son seleccionados, de una "muestra' de la base de radiación emitida. -Hipotesis: La intensidad es proporcional al flujo diferencial angular de los fotones y campo de radiación tratado como un gas de fotones	Siguiendo una selección típica de los fotones y recuento (en cada elemento de volumen): 1.La distancia recorrida la intensidad media total 2.Los tiempos de la distancia del coeficiente de absorción la intensidad media total absorbida 3.Los tiempos de la distancia del coeficiente de dispersión la intensidad media del coeficiente de dispersión la intensidad media dispersada total	Computacional mente intensivas: Las muestras y los rastros de rayos el dominio cada paso de la solución. siempre contiene estadísticas de error	Método de propósito general - le permite hacer gris / no color gris, la emisión, dispersión y absorción Es la opción recomendada para un cálculo de la radiación en medios transparentes	

3. Modelo Monte Carlo

Modelo de radiación	Descripción	Método	Limitaciones	Beneficios	Ejemplos
Modelo de Transferen cia Discreta	Según este modelo, las superficies que forman el dominio son divididas en elementos de superficie desde los cuales se lanza un conjunto de haces discretos de rayos cubriendo todo el ángulo sólido hemiesférico. El camino a lo largo de un rayo se discretiza en secciones. La ecuación de transferencia de calor por radiación se integra analíticamente a lo largo de longitudes espaciales discretas dentro de las cuales se considera que las fuentes de radiación son constantes. Esta integral debe repetirse hasta que el rayo alcanza una superficie opuesta del contorno del dominio. Las cantidades fisicas en cada elemento se supone que son uniformes. Estos rayos tienen que ser rastreados a través del dominio de la misma manera que el segumiento de los fotones en el modelo de Monte Carlo y de transferencia discreta es el mismo. -Hipotesis: La dispersión es isotrópica sistema es razonablemente homogénea	Caminos de fotones desde las superficies de frontera se determinan al comienzo de la carrera Con este método (isotrópico supuesto de dispersión), la intensidad se resuelve a lo largo de los rayos Suponiendo un sistema razonablemente homogénea, la solución se extiende a todo el dominio donde la absorción, emisión y dispersión puede ser resueltos	falta de información de error es computacional mente muy caro cuando hay demasiadas superficies para rastrear los rayos	Los modelos no grises son tratados por el tratamiento de cada banda como un cálculo por separado Mejor calidad de la solución de P1 y Rosseland Modelos, sobre todo cuando hay regiones ópticamente delgadas en el dominio	Horno de combustión

4. Modelo de Transferencia discreta

Tabla 10. Comparación de los modelos de radiación.
Para resolver el problema del intercambio radiativo se ha seleccionado el método aproximado de transferencia discreta (Lockwood y Shah, 1981). La técnica se basa en discretizar la ecuación de transferencia a lo largo de rayos. La trayectoria a lo largo de un rayo es discretizada seccionando ésta en cada volumen finito del problema. Las propiedades físicas de cada volumen se consideran constantes.

Definiendo qR como la potencia radiativa por unidad de superficie, obtenida al integrar la intensidad radiativa I λ sobre el ángulo sólido en todo el espectro de frecuencias (Ec. 3.73), e integrando la ecuación de transporte de la intensidad radiativa (Ec. 3.66) sobre el ángulo sólido, se obtiene la ecuación general de conservación de la energía radiativa (Ec. 3.74).

$$q_{R} = \int_{0}^{\infty} q_{R\lambda} \cdot d\lambda = \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} I_{\lambda}(\hat{s}) \cdot d\Omega \cdot d\lambda$$

$$(3.85)$$

$$\nabla q_{R} = \nabla \int_{0}^{\infty} q_{R\lambda} \cdot d\lambda = -4 \cdot \pi \cdot (k_{a} + k_{s}) \cdot J + \int_{4\pi} Q \cdot d\Omega_{s}$$

$$(3.86)$$

donde

$$J = \frac{1}{4\pi} \int I \cdot d\Omega_s \quad \text{y} \quad \int Q \cdot d\Omega_s = 4 \cdot k_a \cdot I_b + 4 \cdot \pi \cdot k_s \cdot J$$
(3.87)

Esta ecuación de transporte permite determinar en cada celda el término fuente (o sumidero) de radiación del medio q_R , que se introduce a continuación, en la ecuación de conservación de la energía del fluido principal (término *Si*).

Resumen de los modelos empleados en las simulaciones

En la tabla 11 se describe el sistema de ecuaciones que es resuelta en cada etapa.

)

ETAPA	PROBLEMA	MODELO
1	Flujo de la mezcla isotérmica butano-aire	Ecuaciones de conservación de la masa y del momento de Navier- Stokes promediadas (RANS)
	Turbulencia	Modelo k-ɛ
2	Flujo de la mezcla y de productos de combustión	Ecuaciones de conservación de la masa, del momento, de la energía y de especies de Navier-Stokes promediadas (RANS)
	Combustión	Eddy Dissipation
	Turbulencia	Modelo k-ɛ
	Radiación	Transferencia Discreta
3	Flujo laminar de productos de combustión	Ecuaciones de conservación de la masa, el momento y la energía de Navier-Stokes
	Radiación	Transferencia Discreta

Tabla 11. Resumen de los modelos empleados en las simulaciones.

3.5. Condiciones iniciales y condiciones de contorno

Las condiciones iniciales y de frontera asociadas con una EDP deben de especificarse con el fin de obtener una solución única sí se considera que el problema está bien determinado, es decir, sí la solución existe y depende continuamente de sus condiciones de entorno. Las condiciones iniciales se requieren como especificación de arranque en la solución de problemas de propagación o dinámicos, mientras que las condiciones de frontera acotan el dominio de valores de la variable dependiente en la región de análisis, por lo que se requieren dos condiciones de frontera por cada coordenada espacial. Desde el punto de vista de los procesos de transferencia, se tienen tres tipos clásicos de condiciones frontera, los cuales se describen en la Tabla 2.1.

Nombre Ecuación para u Significado físico		Significado físico
Dirichlet	u = f (n)	Frontera definida con valores fijos
Neumann	du/dn = f(n)	Frontera definida con un Flux
Robbins	a (du/dn) + bu = f (n)	Ecuación de transferencia en una interfase

 Tabla 12. Tipos clásicos de condiciones frontera, que se presentan en los problemas de fenómenos de transporte

La correcta definición de las condiciones de contorno constituye una parte fundamental en la definición de un problema numérico.

Una vez planteados todos los modelos es necesario imponer las condiciones de contorno para poder resolver las ecuaciones que describen el proceso:

1. En contornos abiertos:

• Entradas:

En las entradas son especificados el caudal (etapa 1) o la velocidad (etapas 2 y 3), la temperatura del flujo (etapas 1, 2 y 3), las fracciones másicas de los componentes del fluido (etapas 1 y 2). Las condiciones de contorno relativas a la radiación están definidas en términos de la emisividad, la radiación difusa y la temperatura de radiación (etapas 2 y 3).

• Salidas:

 $\frac{\partial u_n}{\partial n} = 0 \qquad \qquad \frac{\partial T}{\partial n} = 0$

En la salida aplicamos condición libre: ∂n y ∂n y una condición de presión de salida (opening) donde se elija el valor de la presión de 0 Pa como presión de referencia.

Para la turbulencia

$$\frac{\partial k}{\partial n} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = 0.$$

2. Condiciones de contorno de pared.

En todas las etapas en las paredes se aplica la condición de contorno de no deslizamiento (Wall-no slip), imponiendo velocidad nula en los nodos del contorno, tanto a la velocidad media como a la fluctuante. Se desprecia la fricción en las paredes. El coeficiente de conductividad térmica del material de las paredes es igual a 0,075 W/m*K. Para definir las condiciones de contorno es necesario un cálculo previo para el cual partimos de los datos iniciales siguientes:

Densidad del gas-butano en condiciones normales: $\rho g = 2,625 \text{ kg/m3}$ Densidad del aire en condiciones normales: $\rho a = 1,29 \text{ kg/m3}$

Las condiciones normales corresponden a la temperatura del aire Ta=0 0C y la presión atmosférica: Patm = 1 atm = 101 kPa

El flujo volumétrico de gas-butano que sale del ciclor es Qg =0,1558 m3 /h

Con estos datos determinamos la cantidad de aire necesaria para la combustión estequiométrica.

De [1] para quemar 0,1558 m³ de gas-butano se necesita Qa=4,82 m³ de aire que contiene Qo₂=1,029 m3 de O₂ (21%). Pero como la cocina no trabaja en condiciones normales, calculamos la densidad y el flujo másico para altura sobre el nivel del mar h = 2543 m, presión atmosférica P = 0,733 atm = 74300 Pa y la temperatura del aire T = 23 0C = 296 K usando la ecuación (3.72).

Como resultado tenemos:

Densidad del gas-butano: $\rho g = 1,752 \text{ kg/m}^3$ Densidad del aire: $\rho a = 0,876 \text{ kg/m}^3$ Densidad del oxígeno: $\rho o^2 = 0,967 \text{ kg/m}^3$ Área de salida del gas del inyector: Ag = 0,8659 mm² Área del cuello del vénturi: A cuello = 85,2241 mm² Cantidad de aire primario [1]:

$$Q_{a.prim} = Q_g \times \sqrt{\frac{\rho_g \times A_{cuello}}{\rho_a \times A_g}} = 0.1558 \times \sqrt{\frac{1,752 \times 85,2241}{0,876 \times 0.8659}} = 2,186 \frac{m^3}{h}$$

Cantidad de oxígeno en el aire primario: Qo2 = 21 Qa.prim / 100 = $21 \cdot 2,186$ / 100 = 0,45906 m³ /h

Cantidad de aire secundario: Qa.sec= Qa - Qa.prim = $4,82 - 2,186 = 2,634 \text{ m}^3/\text{h}$

Flujo volumétrico butano-aire primario: Qmezcla = Qg + Qa.prim = 0,1558+2,186 = 2,3418 m³ /h

Flujo másico del aire primario: Ma.prim = Qa.prim $\rho a = 2,186 \cdot 0,876 = 1,9149 \text{ kg}/\text{h}$ Flujo másico de oxigeno en el aire primario: Mo2= Qo2 ρ o2 = 0,45906 • 0,967 = 0,4439 kg /h

Flujo másico del aire secundario: Ma.sec = Qa.sec $\rho a = 2,634 \cdot 0,876 = 2,3074 \text{ kg}/\text{h} = 0,00064094 \text{ kg}/\text{seg}$

Flujo másico del gas: Mg = Qg $\rho g = 0,1558 \cdot 1,752 = 0,273$ kg /h

Flujo másico total de la mezcla butano-aire primario: Mtot = Mg + Ma.prim = 0,273 + 1,9149 = 2,1879 kg/h = 0,0006078 kg/seg

Fracción de masa de aire en la mezcla butano-aire primario: Ya.prim = Ma.prim / Mtot = 1,9149 / 2,1879 = 0,8752

Fracción de masa de gas en la mezcla butano-aire primario: Yg = Mg / Mtot = 0,273 / 2,1879 = 0,1248

Fracción de masa de oxígeno en la mezcla butano-aire primario: Yo2= Mo2 / Mtot = 0,4439 / 2,1879 = 0,2029

Resumen

Condiciones de contorno en la etapa 1

Flujo másico de la mezcla butano - aire : 0,0006078 kg /seg (la velocidad de entrada es normal a la superficie)

Temperatura: 23° C Fracción de masa de gas butano: 0,1248 Fracción de masa de aire: 0,8752

Condiciones de contorno en la etapa 2

El campo de velocidad en los orificios de salida del quemador: es importado de los resultados de la etapa 1

Temperatura de la mezcla y de aire secundario : 23 0C

Flujo masico de entrada de aire secundario: 0,00064094 kg/seg (la velocidad de entrada es normal a la superficie).

Fracción de masa de gas butano en la mezcla: 0,1248 Fracción de masa de oxígeno en la mezcla: 0,2029 Temperatura de exterior: 23º C

Condiciones de contorno en la etapa 3

El campo de velocidad y temperatura en los orificios de entrada al horno y la distribución de temperatura en la bandeja es importadas de los resultados de simulación de la etapa 2

CAPÍTULO IV RESOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES DE GOBIERNO

4.1. Método de solución

Las ecuaciones que gobiernan la transferencia de masa, cantidad de movimiento, energía, etc., se resuelven en cada uno de los elementos de la malla generada. El procedimiento de resolución consta de 3 elementos principales:

1. Discretización del flujo continuo, es decir, las variables de campo (ρ , u, v, w, p, ...) se aproximan por un número finito de valores discretos en nodos (ρ [i], u [i], v [i], w [i], p [i], ...). Figura

2. Las ecuaciones diferenciales también se discretizan, es decir, las transforman a un sistema finito de ecuaciones algebraicas con variables independientes discretas:

> Ecuaciones Diferenciales = => Ecuaciones algebraicas (continuas) (discretas)

3. El sistema de ecuaciones algebraicas se resuelven y se obtienen los valores de las variables en todos los nodos.



Figura 17. Discretización de variables

Existen muchos métodos para la discretización de las ecuaciones que gobiernan el fluido. A grosso modo, podemos clasificar los distintos esquemas de discretización en tres categorías principales: diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos.

4.1.1. Método de las diferencias finitas.

El método de las diferencias finitas fue el primer método aplicado para obtener la solución numérica de unas ecuaciones diferenciales. La primera persona en emplearlo fue Euler (probablemente en 1768). Este método emplea el desarrollo en series de Taylor para la discretización de las derivadas de las variables de flujo; por ejemplo, si se quiere calcular la derivada de una función escalar U (x) evaluada en un punto xo, tenemos:

$$U(x_o + \Delta x) = U(x_o) + \Delta x \frac{\partial U}{\partial x}|_{x_o} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}|_{x_o} + \dots$$
(4.1)

con esto, se tiene que la primera derivada de U(x) puede aproximarse por:

$$\frac{\partial U}{\partial x}|_{x_o} = \frac{U(x_o + \Delta x) - U(x_o)}{\Delta x} + O(\Delta x) \tag{4.2}$$

Esta aproximación es de primer orden, porque el truncamiento del error es proporcional al término de mayor orden del resto de la serie. Este mismo procedimiento se puede emplear para obtener aproximaciones más exactas del método de las diferencias finitas, simplemente aproximando con más términos de la serie de Taylor que se obtiene. Una ventaja importante del método de las diferencias finitas es su simplicidad teórica y la posibilidad de aumentar la precisión del método sin más que aumentar el orden de aproximación de las derivadas. Por otro lado, este método requiere una malla estructurada, con lo cual el campo de aplicación se ve reducido a algunos problemas, normalmente con geometrías sencillas. Además, este método no puede aplicarse directamente en coordenadas curvilíneas, teniéndose que transformar las ecuaciones de Navier-Stokes de curvilíneas a cartesianas para la resolución del problema. Por este motivo, el método de las diferencias finitas sólo es aplicable en algunas geometrías sencillas. Hoy en día, se usa este método en la simulación numérica directa de la turbulencia (DNS), pero en muy pocas ocasiones se emplea en aplicaciones industriales.

4.1.2. Método de los elementos finitos

El método de los elementos finitos, introducido por Tuner et al. en 1956, se empleó, en principio, para el análisis estructural y fue diez años más tarde cuando comenzó su utilización para la resolución de las ecuaciones de campo en medios continuos. Sin embargo, fue a principios de los 90 cuando el método de los volúmenes finitos adquirió una gran popularidad en la solución de las ecuaciones de Euler y de Navier-Stokes.

El método de los elementos finitos, como método general para la resolución de las ecuaciones de Euler/Navier-Stokes, comienza con una división del dominio en elementos triangulares (en 2-D) o tetraédricos (en 3-D), generando una malla no estructurada. Dependiendo del tipo de elemento y de la precisión que se quiera, se tendrá que definir una malla más o menos fina de elementos. El número total de nodos multiplicado por el número de variables del problema es el número de grados de libertad del problema.

Además, tienen que definirse las llamadas "funciones de forma" que representan la variación de la solución en el interior de los elementos. En la práctica, se emplean normalmente funciones de forma lineales, que utilizan únicamente los nodos pertenecientes a la malla. Las funciones de forma son distribuciones lineales de valor cero fuera del elemento correspondiente a la función. Esto da lugar, a una aproximación de segundo orden en la representación de los resultados.

Este método resulta muy atractivo por el uso de mallas no estructuradas (ampliamente empleadas para la formulación de problemas con geometrías complejas). Además es empleado para el caso particular de fluidos no newtonianos. El método de los elementos finitos tiene una base matemática muy rígida, particularmente en problemas elípticos y parabólicos. Sin embargo, en ciertos casos, el método es matemática mucho mayor. Esto explica porqué el método de los volúmenes finitos se ha hecho tan popular. Sin embargo, ambos métodos se combinan en ocasiones (normalmente en mallas estructuradas), como por ejemplo para el tratamiento de las condiciones de contorno y la discretización de los flujos viscosos.

4.1.3. Método de los volúmenes finitos

El programa Ansys CFX utiliza la metodología de volúmenes finitos, la cual aplica las ecuaciones de conservación en un espacio tridimensional discreto. Este espacio se llama "volumen de control". La metodología consiste en integrar y resolver el conjunto de ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento en las tres direcciones, propiedades turbulentas, especies químicas y energía, en cada volumen de control del dominio computacional de forma acoplada. El procedimiento de deducción de las ecuaciones discretizadas y métodos de solución puede ser encontrado, entre varios, en la referencia [8].

La Ecuación (3.45) es usada como el punto de partida para los procedimientos computacionales en el método de volúmenes finitos. Ajustando φ igual a 1, *u*, *v*, *w* y *i* (ó T ó *ho*) y seleccionando los valores apropiados para el coeficiente de difusión Γ y los términos fuente, obtenemos formas especiales de la Tabla 7 para cada una de las ecuaciones parciales: masa, momento, y conservación de energía.

El paso clave para el método de volúmenes finitos es la integración de la Ecuación (3.45) sobre un volumen de control tridimensional CV produciendo:

$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \, dV + \int_{CV} div(\rho\phi\mathbf{u})dV = \int_{CV} d\dot{v}(\Gamma \text{ grad } \phi)dV + \int_{CV} S_{\phi}dV$$
(4.3)

Las integrales de volumen en el segundo término en el lado izquierdo, el término convectivo y en el primer término del lado derecho, el término difusivo, son reescritas como integrales sobre la superficie limitante del volumen de control usando el teorema de la divergencia de Gauss.

Para un vector *a* este teorema establece:

$$\int_{CV} div \, \mathbf{a} dV = \int_{A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} dA$$
(4.4)

La interpretación física de n.a es el componente del vector a en la dirección del vector normal n a la superficie del elemento dA. Así que la integral de la divergencia de un vector a sobre un volumen es igual a la componente de a en la dirección normal a la superficie con límites del volumen de control integrados sobre el límite entero de la superficie A. Aplicando el teorema de la divergencia de Gauss la ecuación puede ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} \rho \phi dV \right) + \int_{A} \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dA = \int_{A} \mathbf{n} \cdot (\Gamma \ grad \ \phi) dA + \int_{CV} S_{\phi} dV$$
(4.5.)

El orden de la integración y la derivación ha sido cambiado en el primer término del lado izquierdo para ilustrar el significado físico. Este término significa la velocidad de cambio de la cantidad total de propiedad φ del fluido en el volumen de control. El producto $n \cdot (\varphi \varphi u)$ expresa la componente del flux de la propiedad φ debida al flujo del fluido a lo largo del vector n normal al exterior (hacia fuera) así que el segundo término del lado izquierdo, el término convectivo, es la velocidad neta de disminución (decaimiento) de la propiedad φ del elemento del fluido a la convección.

Un flux difusivo es positivo en la dirección de un gradiente negativo de la propiedad φ del fluido, y no a lo largo de la dirección -grad φ . Por ejemplo, el calor es conducido en la dirección del gradiente de temperatura negativo. Así que el producto *n*. (- Γ grad φ) es el componente del flux de difusión a lo largo del vector normal exterior, hacia la salida del elemento de fluido. Similarmente, el producto *n*. (Γ grad φ), el cual es igual a Γ (-*n*. (- grad φ), puede ser interpretado como un flux de difusión positivo en la dirección del vector normal hacia adentro (entrada) –*n*, es decir, dentro del elemento de fluido.

El primer término del lado derecho de la Ecuación (4.5), el término difusivo, es asociado con un flux dentro del elemento y representa la velocidad neta de incremento de la propiedad φ del elemento de fluido debido a la difusión. El término final del lado derecho de esta ecuación da la velocidad del incremento de la propiedad φ como resultado de una fuente dentro del elemento de fluido.

En estado estable la velocidad de cambio de la Ecuación (4.5) es igual a cero. Esto lleva a la forma integral de la ecuación de transporte en estado estable:

$$\int_{A} \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dA = \int_{A} \mathbf{n} \cdot (\Gamma \operatorname{grad} \phi) dA + \int_{CV} S_{\phi} dV$$
(4.6)

El método de los volúmenes finitos emplea directamente las ecuaciones de conservación en su forma integral. Este método discretiza las ecuaciones en cada uno de los poliedros del dominio, en los que previamente se realiza una discretización espacial. La integral de superficie que aparece en el término de la derecha de la ecuación de Navier-Stokes completa (en su forma integral) es aproximada por la suma de los flujos que atraviesan cada una de caras del poliedro. La principal ventaja del método de los volúmenes finitos es que la discretización espacial se lleva a cabo directamente en el espacio físico del problema. Por lo tanto, no hay problemas con la transformación entre sistemas de coordenadas, como ocurre en el método de las diferencias finitas. Comparado con el método de las diferencias finitas, este método es muchísimo más flexible (puede implementarse en mallas estructuradas y no estructuradas); por este motivo, el método de los volúmenes finitos es el más empleado para la resolución de flujos con geometrías complejas. El método de los volúmenes finitos se basa en la discretización directa de las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento y la energía.

Ventajas:

• Robustez para la obtención de máximos o mínimos discretos, rapidez y estabilidad.

• Se adapta a cualquier tipo de malla (geometría compleja),

• Método conservativo por construcción: integrales de superficie y volúmenes de control que comparten fronteras.

Desventajas:

• El inconveniente principal es que es difícil desarrolar en 3D, pues requiere 3 niveles de aproximación: interpolación, diferenciación e integración.

CAPITULO V POST-PROCESO

5.1. Análisis de resultados de simulación de flujo de mezcla butano-aire en el quemador

RESULTADOS DE LA ETAPA 1

a)

En la figura 18 a), b) y c) se puede observar que en los orificios de salida al inicio de la cabeza del quemador el flujo esta dirigido a la izquierda, mientras que en los orificios del final los vectores de velocidad son normales al área de la salida. A causa de esta dirección de flujo las llamas al inicio del quemador son inclinadas y al final rectas como se puede observar en la figura 20 a). También, la velocidad de salida desde los agujeros frontales es mayor que de los posteriores (gráfica 1). El rango de velocidad del flujo dentro del quemador esta en la figura 19







Figura 18 a), b), c): Campo de velocidad de flujo de mezcla butano-aire primario dentro del quemador



Gráfica 1. La velocidad de salida de la mezcla butano-aire primario en los centros de los agujeros del quemador en la parte frontal y posterior.

c)

Units	m s^-1	-
Min	2.96451e-05	[m s^-1]
Max	4.14871	[m s^-1]

Figura 19. El rango de velocidad del flujo dentro del quemador.

RESULTADOS DE LA ETAPA 2

En las figuras 21 y 22 se puede observar la distribución de la temperatura en el interior del calientaplatos y en la bandeja, y en la figura 23 el campo de velocidad en los planos de corte del calientaplatos y en los orificios de salida.



a)



b)

Figura 20. La forma de las llamas. a). Resultado de la simulación, b). La imagen real.



Figura 21. Distribución de la temperatura en la bandeja.





Figura 22. Distribución de la temperatura: a) y b) en el interior del calientaplatos en los planos paralelos a la bandeja c) en la bandeja, obtenida experimentalmente.

c)



Figura 23. El campo de velocidad en el calientaplados: a) en los orificios de salida; b) en el plano paralelo a la bandeja .



Figura 24. El rango de velocidad y temperatura en calientaplatos.



Gráfica 2. La velocidad de salida de los gases de combustión en los centros de los agujeros de la bandeja en la parte izquierda y derecha.

Observando los resultados se ve que los valores mas altos de temperatura se encuentran en la parte central del calientaplatos y más bajos en la parte posterior y la velocidad de salida del calientaplatos es muy irregular, tomando los valores mas pequeñas en el agujero posterior del lado izquierdo.

En la gráfica 2 tenemos los valores de velocidad en el centro de cada agujero del lado derecho y del lado izquierdo del calientaplatos.

RESULTADOS DE LA ETAPA 3



Figura 25. Distribución de la temperatura en el interior del horno en los planos paralelos a la bandeja.



Figura 26. Flujo de gases de combustión en el horno.

Units	c	•
Min		513.346 [C]
Max		692.78 [C]

Figura 27. Rango de temperatura en el horno

En la figuras 25-27 se puede ver la distribución irregular de la temperatura dentro del horno, el rango de temperatura; y en la figura 25 las líneas de flujo de gases de combustión dentro del horno.

5.2. Validación de resultados.

El último paso en el proceso de resolución de un problema con herramientas CFD es determinar si la solución obtenida es suficientemente precisa, y si los resultados obtenidos con la simulación numérica reproducen adecuadamente los procesos reales. Es lo que habitualmente se conoce como "verificación y validación de una simulación numérica".

Al igual que con cualquier técnica experimental que se utilice para describir un proceso real, es necesario llevar a cabo una validación tanto del método como de los resultados obtenidos por ese método. Por lo tanto, de la misma manera que existen unas incertidumbres asociadas al método experimental utilizado, existen unas incertidumbres asociadas al método numérico. Como consecuencia de la rápida expansión en la utilización de herramientas computacionales han surgido aproximaciones estándar de cuantificación de los errores de computación y técnicas de validación de las simulaciones CFD a partir de datos experimentales.

Generalmente, en la mayoría de los trabajos publicados sobre CFD, el método más utilizado para validar los resultados consiste en comparar los resultados de las simulaciones con los resultados experimentales. Sin embargo, de manera más rigurosa, que los resultados de una simulación reproduzcan perfectamente los valores obtenidos experimentalmente no asegura que el modelo numérico reproduzca adecuadamente el proceso real. También hay que determinar los errores numéricos asociados al método. Por ello es preciso distinguir dos etapas diferenciadas en el proceso de aprobación de una simulación: la verificación, que contabiliza los errores numéricos del método, y la validación, que suma a los anteriores los errores característicos del modelado de los procesos reales.



Figura 28. Fuentes de error en los cálculos CFD.

Verificación

La etapa de verificación consiste en determinar los errores numéricos del método computacional utilizado (En la figura 27 se muestra las fuentes de error en los cálculos CFD). Es decir, está relacionado con la buena o mala resolución numérica de las ecuaciones diferenciales. Son errores relacionados con la incertidumbre numérica de la simulación. Los errores numéricos que se suelen considerar son:

• Errores debidos al método iterativo de resolución de las ecuaciones numéricas: Estos errores están asociados a la convergencia global del método. Cuanto mejor sea la convergencia de la solución, los residuos se sitúen en valores muy bajos (< 1E-4) y se cumpla la conservación de la masa en el dominio, menor será la contribución de este error. En general, utilizando códigos comerciales, dada la robustez de éstos, este error se suele considerar despreciable, y se puede estimar a partir de métodos gráficos u otras aproximaciones teóricas.

• Errores asociados a la discretización espacial: Estos errores están asociados al tamaño de la malla. Dentro de los errores numéricos son los más importantes. Podría decirse que la resolución de malla en un modelo computacional es el equivalente a la precisión de un instrumento en el campo experimental. Por ello resulta importante determinar este error. El método utilizado para ello es llevar a cabo estudios de convergencia que incluyen refinamientos progresivos de los elementos de discretización hasta alcanzar una solución que sea independiente del mallado, o que su error esté dentro de la tolerancia del problema.

• Errores asociados a la discretización temporal: Estos errores están asociados al tamaño del paso temporal en problemas transitorios. Al igual que los errores asociados a la discretización espacial para determinar este error, se llevan a cabo estudios paramétricos de convergencia consistente en el refinamiento del paso temporal hasta que se alcanza una solución independiente de éste o dentro de la tolerancia del problema.

Validación

La etapa de validación consiste en determinar los errores de modelado del método computacional utilizado. Es decir, está relacionado con los errores derivados de las aproximaciones, hipótesis y simplificaciones realizadas en la representación matemática del proceso real. El error de validación está compuesto por:

• Errores asociados al método numérico: Es decir, los errores determinados en la etapa de verificación.

• Errores asociados a los datos experimentales sobre los que se va a validar la simulación: Es decir, los errores derivados del proceso de medida experimental y la precisión del aparato de medida. Esta incertidumbre se suele determinar a través de procesos de calibración de los instrumentos y siguiendo algún procedimiento estándar de medida que tenga prefijadas unas incertidumbres del método.

• Errores asociados a las aproximaciones, hipótesis y simplificaciones de los modelos matemáticos: No existe una aproximación conocida para obtener una estimación de este error, así que se determina indirectamente, una vez determinados todos los errores anteriores.

Para validar los modelos matemáticos seleccionados usaremos la comparación de los resultados de simulación numérica con los datos obtenidos experimentalmente.

Para validar los resultados de simulación de la etapa 2, calentamos la bandeja sin enlozar durante 1 minuto en el horno para localizar las áreas más calientes y comparamos los resultados de este ensayo con los resultados obtenidos mediante simulación.

Como se puede observar en las figuras 22 b) y c) el área más caliente en el interior del calientaplatos coincide con los resultados obtenidos experimentalmente.

Para validar los resultados de la simulación de la etapa 3 situamos dos correderas con termocuplas en posiciones indicadas en la figura 28 dentro del horno precalentado 45 minutos, una a 65 cm y otra a 130 cm desde la bandeja. Los datos obtenidos se encuentran en la tabla 13. Luego estos resultados comparamos con los obtenidos mediante la simulación que se encuentran en la misma tabla. Luego graficamos los resultados en el mismo plano.



Figura 29. La posición de termocuplas utilizada para medir la temperatura dentro del horno.

HORNO					
corredera 1	situada a 65 cm de	sde la bandeja	corredera 2	situada a 130) cm desde la bandej
número del		Datos obtenidos	número del	Temperatur	Datos obtenidos
punto de	Temperatura	mediante la	punto de	o, a medida	mediante la
medición	medida ,0 C	simulación	medición	С	simulación
1	220	580	1	230	609
2	241	584	2	232	612
3	246	586	3	235	612
4	238	585	4	240	612
5	242	586	5	242	613
6	260	589	6	249	614
7	255	586	7	249	614
8	233	584	8	236	610
9	224	586	9	232	611
10	248	587	10	237	613
11	253	600	11	242	620
12	255	602	12	250	622
13	259	600	13	256	621
14	264	600	14	253	622
15	267	601	15	263	624
16	265	601	16	253	624
17	253	631	17	247	630
18	260	635	18	252	633
19	287	639	19	286	647
20	264	646	20	260	642
21	260	635	21	253	636
22	286	634	22	269	630
23	269	644	23	258	639

 Tabla 13. Los valores de la temperatura el los puntos indicados en la figura 28, obtenida experimentalmente y mediante la simulación.



Gráfica 3 a) y b). Comparación de la temperatura de los gases de combustión medida en los puntos indicados en la figura del horno y obtenida mediante la simulación.

Observando las gráficas 2 a) y b) se ve que el comportamiento es similar, pero la temperatura es mas elevada en los resultados de la simulación, esto puede darse a causa de las pérdidas de temperatura hacia el exterior, que en el modelo se simplificó y también porque la hipótesis planteada era que la combustión es estequiométrica, lo que no es la realidad del caso. Pero como el problema está en la distribución de las temperatura y no en el valor de ella el modelo es válido para la realización de optimizaciones y su regulación.

También en las mismas gráficas y en la tabla 13 se ve que la temperatura minima está en el punto 1 y minima en el punto 19.

CAPÍTULO VI CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1. Conclusiones

El modelado de este problema requiere un gran esfuerzo debido a varias razones. Por un lado, aparecen numerosos fenómenos complejos que han de ser modelados, como la combustión en el quemador o la radiación dentro del horno. Además el problema es de carácter evolutivo ya que al encender el quemador, el horno, durante un intervalo de tiempo, se esta calentando.

De este modo incluso los modelos más simples que utilicen algunas características del problema, como la naturaleza estacionaria cuando el horno trabaja en condiciones nominales o que eviten modelar con detalle los fenómenos de combustión, presentan una complejidad notable y conducen a costes de cálculo muy elevados.

Todo ello hace que, aunque el modelado matemático del funcionamiento del horno resulte una herramienta muy interesante, en el diseño o rediseño del proceso existan graves inconvenientes para su uso. En primer lugar la complejidad de este modelo hace que sea necesario su manejo por parte de personal con gran experiencia en simulación numérica y, en segundo lugar, los necesariamente largos tiempos de cálculo involucrados en cada simulación (del orden de horas) hace incómoda la comparación de varias alternativas de diseño.

Uno de los mayores inconvenientes de las técnicas CFD consiste en que no siempre es factible llegar a obtener resultados suficientemente precisos y siempre está presente la posibilidad de cometer graves errores en cuestiones básicas. Esto proviene de:

• Simplificación del fenómeno a estudiar para que el hardware y software sean capaz de abordarlo. El resultado será tanto más preciso cuanto más adecuadas hayan sido las hipótesis y las simplificaciones realizadas.

• La existencia de insuficientes e incompletos modelos para la simular el efecto de la turbulencia, radiación y la combustión .

• La tendencia humana de aceptar como auténtico todo lo que se ha obtenido utilizando un ordenador, sobre todo cuando se presentan los resultados en forma atractiva.

Aunque los principios recogidos en el modelo pueden aplicarse en la mayoría de los escenarios de combustión, existen algunas limitaciones en sus algoritmos. El proceso físico de combustión, la transferencia de calor por radiación y conducción, como ocurre en todo modelo, es una compleja "simplificación" del fenómeno real (la realidad es más complicada que la representaciones matemáticas).

Los resultados de los cálculos son sensibles a los parámetros numéricos y físicos.

Para la mayoría de las aplicaciones, CFD utiliza un modelo de combustión de fracción de mezcla. El modelo asume que la combustión está controlada por la mezcla, y que la reacción del combustible y el oxígeno es infinitamente rápida, a pesar de la temperatura. Para lugares grandes y bien ventilados es una buena asunción, sin embargo, si la combustión se realiza en un compartimiento poco ventilado, el combustible y el oxígeno se mezclan pero no se quemarán.

La transferencia de calor por radiación se incluye en el modelo mediante la solución de la transmisión de calor por radiación para un gas gris que no se dispersa y, en algunos casos limitados, empleando un modelo de banda ancha. La ecuación se resuelve utilizando una técnica similar a la de los métodos de volúmenes finitos lo que hace que este modelo tenga muchas limitaciones.

Observando los resultados de la simulación se pudo determinar que una de las causas de la distribución irregular de la temperatura es la geometría del quemador y el orificio central en la bandeja que provoca que los gases calientes se concentran en un solo lado del horno.

Problemas presentados durante el trabajo:

• Propagación del error. Se usaron los valores aproximados de los resultados de la etapa 1 y 2 como condiciones de frontera para la simulación de la etapa 2 y 3 respectivamente.

• El problema no está bien definido, no se sabe con exactitud cual es el flujo másico de aire secundario, de que forma entra al interior del calientaplatos y por donde

entra. Se usó un ensayo de prueba-error para determinar el lugar de entrada que proporcionó mejor resultado.

• No se analizó la distribución de calor por las paredes lo que afectó el resultado.

• La combustión se consideró estequiométrica. Sería nesesario verificar los resultados con combustión rica y pobre.

El modelo puede ser utilizado para estudiar como influyen los cambios en la configuración del quemador o forma y la pósición de los orificios en la bandeja en la distribución de temperatura en el horno.

6.2. Recomendaciones.

1. El problema de transferencia de calor por radiación es complejo, debido en primer lugar a la dificultad para resolver la ecuación de transferencia radiactiva en un campo tridimensional, y por otra parte, al cálculo de la contribución volumétrica del CO_2 y el H_2O a la radiación.

Aparte del modelo de radiación, es importante reconocer que los gases pueden absorber o emitir energía. En la combustión de gas natural, las especies que participan de la radiación son el vapor de agua o el CO₂, principalmente. Por debajo de la temperatura de disociación, dichos productos de combustión emiten y absorben radiación. Estos efectos dificultan el cálculo de transferencia por radiación. Afortunadamente existen modelos que permiten calcular las propiedades radiantes de los productos de combustión, tales como el modelo de suma ponderada de gases grises (WSGGM, por sus siglas en inglés). En este modelo se reemplaza la mezcla gaseosa por un cierto número de gases, de tal manera que el intercambio de radiación es calculado separadamente para cada gas y el flux total se obtiene al sumar el flux de cada uno, ponderando por factores. La precisión del método reside en la elección de los coeficientes de ponderación.

2. Los tiempos de cálculo necesariamente largos involucrados en cada simulación (del orden de horas) hace incómoda la comparación de varias alternativas de diseño. Para obtener los resultados de simulación numérica en tiempos mucho mas reducidos se recomendaría el uso de interpolación de los datos obtenidos en simulaciones previas.

3. Los códigos comerciales de CFD pueden ser muy poderosos, pero requieren un alto nivel de habilidades y comprensión por parte del operador para que se puedan obtener unos resultados significativos en situaciones complejas. Los usuarios deben estar familiarizados con las herramientas del cálculo, álgebra elemental de matrices y vectores los métodos numéricos básicos. Además debe haber un conocimiento de las leyes de conservación de masa, momento y energía.

4. Lo ideal para la validación de un trabajo numérico es la comparación con resultados experimentales. Sería interesante usar métodos como por ejemplo el PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) para medir campos de concentraciones y temperaturas en este tipo de hornos y comparar con resultados numéricos.

5. Desde el punto de vista numérico pueden ser testadas otras configuraciones geométricas, variando el diámetro de los agujeros de salida de mezcla reactiva y su espaciamiento relativo y determinar numéricamente un quemador eficiente desde el punto de vista de combustión, o variar la posición y el diámetro de los agujeros de entrada de gases al horno que permiten compensar la distribución irregular de temperaturas y velocidades de gases que entran al horno desde calientaplatos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Brizuela, Dr. Ing. E., Romano, Dra. Ing. S. D., *COMBUSTIÓN*, Tomo 1, Departamento de Ingeniería Mecánica y Naval, Facultad de Ingeniería, UBA, 2003.

2. Brizuela, Dr. Ing. E., Romano, Dra. Ing. S. D., *COMBUSTIÓN*, Tomo 2, Departamento de Ingeniería Mecánica y Naval, Facultad de Ingeniería, UBA, 2003.

3. SABAF, CORSO FORMAZIONE, gennaio 2007.

4. Cengel, Yunus A., Boles, Michael A., *TERMODINÁMICA*, Sexta edición, McGraw-Hill, México, 2008.

5. Газовые горелки. Иссерлин А.С. 1966 г. djvu

6. Основы расчета и проектирования газовых горелок. Иванов Ю.В. 1963 г.pdf

7. Poinsot, Therry, Veynante, Denis, *THEORETICAL AND NUMERICAL COMBUS-TION*, Second Edition, Edwards, USA, 2005.

8. Versteeg, H. K., Malalasekera, W., *AN INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS, THE FINITE VOLUME METHOD*, Longman Sientific &Technical New York, 1995.

9. Oliver Olivella, Xavier, *MECÁNICA DE MEDIOS CONTINUOS PARA INGENIE-ROS*, Edicions UPC, 2000.

10. http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/3718

11. Oran, Elaine S., Boris, Jay P., *NUMERICAL SIMULATION OF REACTIVE FLOW*, Elsevier, New York, Amsterdam, London, traducido a ruso e impreso Mir 1990.

12. Documentación de Ansysa). Ansys CFX Tutorials

13. Vázquez, Juan Luis, *FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA DE FLUIDOS*, Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, España, 2003

14. Ballesteros Tajadura, Rafael, González Pérez, José, Fernández Oro, Jesús Manuel, Arguelles Díaz, Katia María, *TÉCNICAS NUMÉRICAS EN MECÁNICA DE FLUIDOS*, Universidad de Oviedo Área de mecánica de fluidos, 2003 http://web.uniovi.es/Areas/Mecanica.Fluidos/

15. White, Frank M., *MECÁNICA DE FLUIDOS*, Sexta edición, McGraw-Hill, México, 2008.

16. Notes For the First Year Lecture Course: *AN INTRODUCTION TO FLUID MECHA-NICS SCHOOL OF CIVIL ENGINEERING*, University of Leeds. CIVE1400 FLUID MECHANICS Dr. Andrew Sleigh, May 2001.