



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA SALESIANA
UNIDAD DE POSGRADOS

**MAESTRÍA EN MÉTODOS MATEMÁTICOS
Y SIMULACIÓN NUMÉRICA EN
INGENIERÍA**

Proyecto de Investigación y desarrollo
previa a la obtención del Grado de
Magister en Métodos Matemáticos y
Simulación Numérica en Ingeniería

**ANÁLISIS MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN
NUMÉRICA DEL COMPORTAMIENTO DE
FLUIDOS EN UN CALDERO PIROTUBULAR
VERTICAL**

Autor:
Jhoffre Maldonado Durazno

Dirigido por:
Olena Leonidivna Naidiuk, MC.

**ANÁLISIS MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN
NUMÉRICA DEL COMPORTAMIENTO DE
FLUIDOS EN UN CALDERO PIROTUBULAR
VERTICAL**

ANÁLISIS MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL COMPORTAMIENTO DE FLUIDOS EN UN CALDERO PIROTUBULAR VERTICAL

JHOFFRE FERNANDO MALDONADO DURAZNO

Ingeniero en Informática
Maestría en Métodos Matemáticos y Simulación Numérica en Ingeniería
Unidad de Posgrados
Universidad Politécnica Salesiana

Dirigido por:

ING. OLENA LEONIDIVNA NAIDIUK

Ingeniero Mecánico
Master en Métodos Numéricos para Diseño en Ingeniería
Docente de la Universidad Politécnica Salesiana
Unidad de Posgrados
Universidad Politécnica Salesiana



Cuenca - Ecuador

JHOFFRE FERNANDO MALDONADO DURAZNO

Análisis Matemático y Simulación Numérica del Comportamiento de Fluidos en un Caldero Piro tubular Vertical

Universidad Politécnica Salesiana Cuenca-Ecuador, 2018

Maestría en Métodos Matemáticos y Simulación Numérica en Ingeniería

Formato 170 x 240

Páginas 60

Breve reseña del autor e información del contacto



Jhoffre Fernando Maldonado Durazno

Ingeniero en Informática

Maestría en Métodos Matemáticos y Simulación Numérica en Ingeniería

Universidad Politécnica Salesiana

jhoffreman@hotmail.com

Dirigido por:



Olena Leonidivna Naidiuk

Ingeniero Mecánico

Master en Métodos Numéricos para Diseño en Ingeniería

Docente de la Universidad Politécnica Salesiana

oneira@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

©2018 Universidad Politécnica Salesiana.

CUENCA - ECUADOR - SUDAMÉRICA

JHOFFRE FERNANDO MALDONADO DURAZNO

Análisis Matemático y Simulación Numérica del Comportamiento de Fluidos en un Caldero Piro tubular Vertical

Edición y Producción:

Jhoffre Fernando Maldonado Durazno.

Diseño de la portada:

Jhoffre Fernando Maldonado Durazno.

IMPRESO EN ECUADOR - PRINTED IN ECUADOR

INDICE GENERAL

INDICE GENERAL	i
INDICE DE FIGURAS	iv
ÍNDICE DE TABLAS	vi
Introducción	vii
Objetivos	vii
Objetivo General	vii
Objetivos Específicos	vii
Estructura del trabajo	vii
Antecedentes	viii
CAPÍTULO 1	1
1.1 Introducción	1
1.2 CFD y ANSYS Fluent	1
1.2.1 Ecuaciones de conservación	1
1.2.2 Ecuación de conservación de la Masa	2
1.2.3 Ecuación de cantidad de Movimiento	4
1.2.4 Ecuación de la Energía	5
1.2.5 Ecuación diferencial de energía interna y cinética	6
1.3 Combustión	7
1.3.1 Introducción	7
1.3.2 Mezclas de Escala de Tiempo	8
1.3.3 Funciones de Densidad de Probabilidad	9
1.3.4 Modelado de mezcla turbulenta	12
1.4 Cambio de Fase del Flujo	16
1.4.1 Introducción	16
1.4.2 Modelos Computacionales	16
1.4.2.1 Modelo Eulerian	16

1.4.2.2 El modelo de mezcla	17
1.4.2.3 Modelo VOF (Volume of Fluid)	20
1.4.3 Condiciones de Límites y Fronteras.....	21
1.4.4 Fase dispersa Lagrangiana	22
1.4.5 Paredes ásperas.....	22
1.4.6 Fase dispersa Euleriana	23
1.5 Metodología de simulación numérica en ANSYS Fluent	23
1.5.1 Algoritmo de resolución	24
1.6 Discretización Espacial e Interpolación.....	24
1.6.1 Ecuaciones de estado	26
1.7 Método de los Volúmenes finitos	26
1.8 Residuos y Convergencia	27
CAPÍTULO 2	29
2.1 Introducción.....	29
2.2 Funcionamiento del Caldero.....	29
2.3 Descripción del Caldero	30
2.4 Simulación del Caldero por medio del Software ANSYS Workbench	32
2.4.1 Construcción de la Geometría	32
2.4.2 Simplificación de la Geometría	34
2.4.3 Mallado del Caldero	35
2.5 Simulación de la cámara de combustión	36
2.5.1 Análisis de la Cámara de Combustión.....	40
2.6 Simulación de la cámara de cambio de fase	43
2.6.1 Análisis de la Cámara de Cambio de Fase	47
CAPITULO 3	55
3.1 Introducción.....	55
3.2 Ciclo a Validar	55
3.3 Validación de la Presión.....	57
CAPÍTULO 4	59

4.1 Conclusiones	59
4.2 Recomendaciones	59
4.3 Bibliografía	60

INDICE DE FIGURAS

CAPITULO 1

Figura 1. 1. Volumen fluido arbitrario.....	2
Figura 1. 2. Dirección de flujo en el eje x.....	3
Figura 1. 3. Perfiles de concentración entre los fluidos A y B.....	8
Figura 1. 4. Mezcla de flujo en una tubería	9
Figura 1. 5. Medición de una fracción de mezcla en un punto determinado. (a) Datos netos (b) Histograma PDF.....	10
Figura 1. 6. Mezcla en la turbulencia Homogénea	11
Figura 1. 7. Una burbuja ascendente, método de conjunto de niveles (izquierda) y el método de volumen de fluido (derecha).....	19
Figura 1. 8. Masa y transferencia de calor entre una partícula y un fluido a granel.....	19
Figura 1. 9. Partícula colisionando con una pared rugosa.....	22
Figura 1. 10. Algoritmo Solver Acoplado	24
Figura 1. 11. Nodos y volúmenes de control. Izquierda MEF. Derecha MVF.....	27

CAPITULO 2

Figura 2. 1. Componentes para el funcionamiento del Caldero Pirotubular Vertical.....	30
Figura 2. 2. Dimensiones de la Cámara de combustión, vista de Planta y vista Lateral	30
Figura 2. 3. Dimensiones de la Cámara de combustión, vista frontal y vista isométrica	31
Figura 2. 4. Dimensiones de la Cámara de Cambio de Fase, vista Superior y vista Lateral	31
Figura 2. 5. Dimensiones de la Cámara de Cambio de Fase, vista Frontal y vista Isométrica	32
Figura 2. 6. Geometría de la cámara de Combustión (parte inferior), cámara de cambio de fase (parte superior), realizado en “Desing Modeler”	33
Figura 2. 7. Cámara de combustible simplificado	34
Figura 2. 8. Cámara de Cambio de Fase simplificada	34
Figura 2. 9. Numero de Nodos y Elementos al ser mallado la cámara de combustión	35
Figura 2. 10. Malla de la cámara de Combustible	35
Figura 2. 11. Numero de Nodos y Elementos al ser mallado la cámara de cambio de fase	36
Figura 2. 12. Malla de la cámara de Combustible	36
Figura 2. 13. Datos generales	37
Figura 2. 14. Valores de Convergencia.....	40
Figura 2. 15. Iteraciones	40
Figura 2. 16. Ignición en la Cámara de Combustión	41
Figura 2. 17. Temperatura de la línea referencial en la Cámara de Combustión	41
Figura 2. 18. Vórtices en la Cámara de Combustión	42
Figura 2. 19. Representación Volumétrica de la distribución de la temperatura.....	42
Figura 2. 20. Datos generales de la cámara de Cambio de Fase	43
Figura 2. 21. Actividades a Calcular	46
Figura 2. 22. Numero de Iteraciones para cálculo de cambio de fase	47
Figura 2. 23. Fracción volumétrica del agua a los 0 segundos.....	47
Figura 2. 24. Fracción volumétrica del agua a los 30 segundos.....	48
Figura 2. 25. Fracción volumétrica del agua a los 60 segundos.....	48
Figura 2. 26. Fracción volumétrica del agua a los 90 segundos.....	49
Figura 2. 27. Fracción volumétrica del agua a los 120 segundos.....	49

Figura 2. 28. Fracción de volumen de Vapor en 0 segundos	50
Figura 2. 29. Fracción de volumen de Vapor en 30 segundos	50
Figura 2. 30. Fracción de volumen de Vapor en 60 segundos	51
Figura 2. 31. Fracción de volumen de Vapor en 90 segundos	51
Figura 2. 32. Fracción de volumen de Vapor en 120 segundos	52
Figura 2. 33. Presión de Vapor en 0 segundos.....	52
Figura 2. 34. Presión de Vapor en 30 segundos.....	53
Figura 2. 35. Presión de Vapor en 60 segundos.....	53
Figura 2. 36. Presión de Vapor en 90 segundos.....	54
Figura 2. 37. Presión de Vapor en 120 segundos.....	54

CAPITULO 3

Figura 3. 1. Curvas de funcionamiento del Caldero en el experimento	55
Figura 3. 2. Ciclo de la presión a validar	57
Figura 3. 3. Comparación de la Presión Experimento vs Simulación	58

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. 1. Datos obtenidos del Experimento	56
Tabla 1. 2. Datos obtenidos de la Simulación	57

Introducción

Con el avance tecnológico que cada vez se va incrementando, ha hecho que nuevas técnicas de estudio sigan revolucionando las soluciones en la industria, una de estas técnicas es la simulación numérica y los métodos matemáticos, que son herramientas muy importantes para la resolución de diferentes situaciones en el campo de ingeniería. Con la simulación se puede simplificar muchos procesos, elaboración de prototipos, etc. Para esto existen varios tipos de simuladores que pueden representar el análisis de diferentes magnitudes como presión, velocidad, turbulencia, temperatura, esfuerzos, etc.

Existen varios campos de aplicaciones para la simulación por medio de software, especialmente en las ingenierías desde casos muy prácticos hasta complejos y los resultados son muy satisfactorios. El software de ANSYS es una herramienta muy completa que permite realizar este tipo de simulaciones por lo cual se optó para realizar el proyecto de tesis.

En la simulación del caldero por medio de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD Computational Fluid Dynamics), se elige un método para incorporar las condiciones a ser simuladas y sus resultados serán validados con los obtenidos en el experimento.

Objetivos

Objetivo General

Realizar el análisis matemático y simulación numérica del comportamiento de fluidos en un caldero pirotubular vertical

Objetivos Específicos

- Plantear el modelo matemático
- Definir el dominio de análisis y condiciones de contorno
- Resolver el modelo mediante el software CFD
- Analizar y validar los resultados

Estructura del trabajo

El presente trabajo muestra la simulación del comportamiento de los fluidos de un caldero pirotubular vertical por medio del software ANSYS Workbench, para lo cual se va a realizar el diseño de la geometría, discretización, preproceso, proceso y posproceso. Este desarrollo se aplicará tanto a la simulación de la combustión como a la simulación del cambio de fase.

El análisis matemático a través de las ecuaciones y variables, nos proporcionará la información, de cómo está funcionando el sistema en cada uno de los puntos.

La utilización del software de simulación, por medio de sus diferentes métodos, permite obtener la solución del modelo matemático y visualizar los resultados.

Luego se realiza la validación comparando los resultados de simulación con los datos experimentales para verificar si el modelo matemático seleccionado, es el adecuado

Antecedentes

Desde la revolución industrial el diseño y la optimización de cualquier dispositivo, mecanismo o sistema, se fueron mejorando con el uso de diferentes métodos numéricos. Con la incorporación de las computadoras, que ha tenido un desarrollo muy importante en la sociedad, y por la demanda de información y aplicaciones, estas, cada vez son más sofisticadas, por lo tanto, la evolución de software y hardware es más avanzado, permitiendo la introducción en varios campos de la ingeniería. La aplicación del software, facilita la resolución de ecuaciones y variables, para lo cual se necesitará crear un procedimiento que genere los resultados esperados. De esta forma, la metodología usada, sea accesible a la mayor cantidad de personas que se dedican al diseño y estudio del comportamiento de sistemas.

Estos métodos nos permiten obtener productos con parámetros de funcionamiento óptimos, en la forma más rápida, ahorrando recursos.

Por ejemplo, en el caso de construcción de calderos, su diseño y construcción, en la mayoría de los casos, se realiza en forma empírica, y es necesario implementar una metodología, uso de la cual permite obtener un producto competitivo y más eficiente.

En el presente trabajo, se pretende realizar la simulación del caldero pirotubular vertical, el cual determinara el comportamiento del sistema, y los parámetros de funcionamiento, puedan ser usados para su optimización.

Para dar validez a la metodología, es necesario realizar la comparación de los datos obtenidos mediante la simulación y el experimento, para ello se va a utilizar un caldero existente, el cual se verificará que el sistema se encuentre en las condiciones óptimas, por lo que, se revisan las conexiones eléctricas, de mando y de fuerza, sistemas de nivel de agua, termostatos, revisión de la bomba de agua, tuberías, empaques, el quemador, sistemas de aislamiento, etc. Con la información verificada, se procede con la puesta en funcionamiento del caldero.

CAPÍTULO 1

ANÁLISIS MATEMÁTICO

1.1 Introducción

El software de ANSYS Workbench es una de las herramientas más importantes para la resolución de sistemas, debido a la capacidad de realizar la geometría, mallado y cálculos de los mismos. El software está compuesto de varios módulos que sirven para diferentes aplicaciones tales, como análisis electromagnético, mecánico, térmico, de fluidos, y sólidos.

1.2 CFD y ANSYS Fluent

Para Kessler (2016) la **Dinámica de Fluidos Computacional** o CFD (del inglés *Computational Fluid Dynamics*) es el área de conocimiento que trata sobre la simulación numérica de flujos fluidos, transferencia de calor y fenómenos relacionados tales como reacciones químicas, combustión, aeroacústica etc.

ANSYS es un software que posee varios módulos para simulaciones electromagnéticas, mecánicas, estructurales, fluidos, etc., en este caso se va a utilizar dentro del código CFD el software Fluent debido a que posee las herramientas adecuadas para la simulación de fluidos por medio del método de volúmenes finitos. A continuación, se describen las ecuaciones de conservación y la metodología de simulación numérica en Fluent. (Durán, 2017)

1.2.1 Ecuaciones de conservación

Según Durán (2017) por medio de los principios físicos se pueden obtener las diferentes ecuaciones para la descripción de movimiento de los fluidos, de tal forma está sujeto a un volumen fluido arbitrario V_f como se muestra en la figura 1.1.

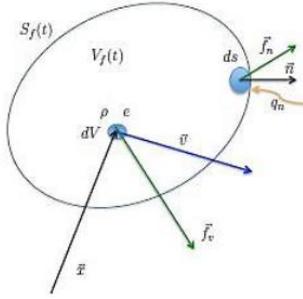


Figura 1. 1. Volumen fluido arbitrario

1.2.2 Ecuación de conservación de la Masa

Para Durán (2017), la ecuación de conservación de masa o también conocida como de continuidad nos indica que V_f no varía con el tiempo por lo tanto,

$$\frac{d}{dt} \int_{V_f} \rho dV = 0 \quad (1.1)$$

Aplicando en la ecuación (1.1), en el teorema de transporte de Reynolds (1.2), con $\varphi = \rho$, y aplicando el teorema de Gauss a la integral de superficie S_c en las ecuaciones integradas (1.3), se obtiene la ecuación de continuidad en su forma conservativa (1.4)

$$\frac{d}{dt} \int_{V_f} \varphi dV = \int_{V_c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV + \int_{S_c} \varphi (\vec{v} \cdot \vec{n}) dS \quad (1.2)$$

$$\int_{V_f} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{V_f} \nabla \cdot (\rho \vec{v}) dV = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1.4)$$

Para la forma diferencial de conservación de masa en un sistema de fluidos, existen dos tipos de flujo másico: advectivo y difusivo, donde el campo de concentración se define como $C(x,y,z)$, el coeficiente de difusión a lo largo de \vec{n} es D , el volumen de control cV , superficie de control cS , la velocidad $\vec{V}(u,v,w)$ y \vec{n} a la normal de superficie, por lo tanto la conservación de masa viene definida por la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{cv} c dV_f = - \int_{cs} C \bar{V} \cdot \bar{n} ds + \int_{cs} D_n \frac{\partial C}{\partial n} ds \pm S \quad (1.5)$$

Velocidad de cambio de masa en el tiempo dentro de cv	Flujo de advección entrante en el volumen de control	Flujo difusivo entrante en el volumen de control	Fuente sumidero
---	--	--	-----------------

La forma diferencial de conservación de masa se deduce expresando (1.5) para un volumen cúbico infinitamente pequeño. El volumen es lo suficientemente pequeño para que asumamos que la concentración en su interior es esencialmente uniforme. Además, es rígido, de modo que las dimensiones δx , δy , y δz son constantes. Las dos integrales de superficie se reducen a una suma de flujos que atraviesan cada una de las seis caras del cubo. Mitopencourseware (2003)

$$\frac{\partial C}{\partial t} \partial V_f = \sum_{i=1}^6 \left[-C \bar{V} \cdot \bar{n} ds + D_n \frac{\partial C}{\partial n} ds \right]_i \pm S \quad (1.6)$$

Se puede imaginar el flujo en dirección \mathbf{x} que atraviesan las caras designadas con 1 y 2, y situadas en $x = x_1$ y x_2 , respectivamente.

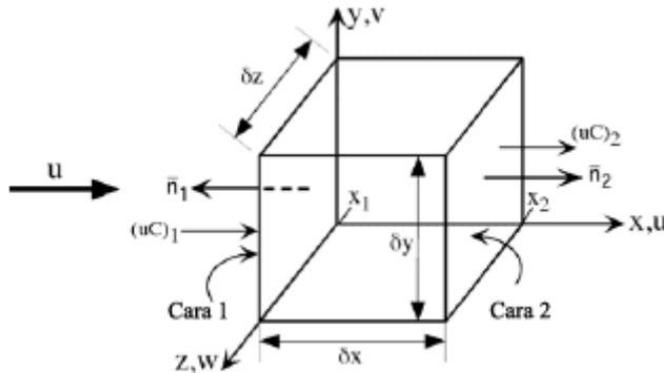


Figura 1. 2. Dirección de flujo en el eje x.

En la cara 1 \bar{n}_1 apunta en dirección \mathbf{x} negativa, de modo que $\bar{V} \cdot \bar{n} = -u$, y $\frac{\partial C}{\partial n} = -\partial C / \partial x$. El cálculo de la integral de superficie para la cara 1 es, por lo tanto:

$$\text{Flujo a través de 1} = (uC)_1 \delta y \delta z - (D_x \partial C / \partial x)_1 \delta y \delta z \quad (1.7)$$

Para la cara 2 es similar, teniendo en cuenta que \mathbf{n} apunta en dirección \mathbf{x} positiva:

$$\text{Flujo a través de 2} = -(uC)_2 \delta y \delta z + (D_x \partial C / \partial x)_2 \delta y \delta z \quad (1.8)$$

El flujo neto en dirección \mathbf{x} que entra en el volumen de control es la suma de (1.7) y (1.8).

$$\text{Flujo neto en } x = ((uC)_1 - (uC)_2 - (D_x \partial C / \partial x)_1 + (D_x \partial C / \partial x)_2) \partial y \partial z \quad (1.9)$$

Si asumimos que C , u , $\partial C / \partial x$, y D_x , son funciones continuas de \mathbf{x} , se puede utilizar una expansión de Taylor para expresar cada parámetro en x_2 como una función del mismo parámetro en x_1 .

$$(uC)_2 = (uC)_1 + \frac{\partial}{\partial x} (uC) \partial x + \text{elementos de orden superior.} \quad (1.10)$$

$$(D_x \frac{\partial C}{\partial x})_2 = (D_x \frac{\partial C}{\partial x})_1 + \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial C}{\partial x}) \partial x + \text{elementos de orden superior.} \quad (1.11)$$

Si descartamos los elementos de orden superior y sustituimos $(uC)_2$ y $(D_x \partial C / \partial x)_2$ en (1.9) por las expresiones (1.10) y (1.11), entonces (1.9) se convierte en:

$$\text{Flujo neto en } x = \left[-\frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right] \partial x \partial y \partial z \quad (1.12)$$

Se pueden hallar expresiones similares para el flujo a través de las cuatro caras restantes. Combinándolas en (1.6) y teniendo en cuenta que $\partial V = \partial x \partial y \partial z$

La conservación de la masa en forma diferencial viene dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial uC}{\partial x} - \frac{\partial vC}{\partial y} - \frac{\partial wC}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial C}{\partial z} \pm S \quad (1.13)$$

Esta expresión se puede simplificar bajo las siguientes condiciones. En primer lugar, hay que tener en cuenta la expansión de los flujos advectivos de (12),

$$\frac{\partial uC}{\partial x} - \frac{\partial vC}{\partial y} - \frac{\partial wC}{\partial z} = \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right] C + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1.14)$$

1.2.3 Ecuación de cantidad de Movimiento

Según Durán (2017), las fuerzas que actúan sobre un objeto determinan la cantidad de movimiento (segunda ley de Newton), este principio se aplica al volumen de control de la figura 1.1

$$\frac{d}{dt} \int_{V_f} \rho \bar{v} dV = \int_{V_f} \bar{f}_v dV + \int_{S_f} \bar{f}_n dS \quad (1.15)$$

Donde,

\vec{f}_v fuerza por unidad de volumen

\vec{f}_n fuerza por unidad de superficie

Al aplicar el teorema de transporte ecuación (1.2), considerando que las fuerzas por unidad de superficie pueden escribirse como el producto escalar del tensor de esfuerzos $\vec{\tau}$ por el vector normal a la superficie se obtiene la siguiente ecuación (1.16)

$$\int_{V_f} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) dV + \int_{S_f} \rho \vec{v} \vec{v} \cdot \vec{n} dS - \int_{S_f} \vec{n} \cdot \vec{\tau} dS = \int_{V_f} \rho \vec{f}_m dV \quad (1.16)$$

Si se aplica el teorema de Gauss en la ecuación (1.6) se obtiene la diferencial de la ecuación del momento de forma análoga como la ecuación de la continuidad como se expone a continuación

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{f}_m \quad (1.17)$$

También puede expresarse el tensor de esfuerzos en función de la presión y la viscosidad, para lo cual se considera que los fluidos newtonianos, según la ley de Stokes se expresa como una componente estática (gradiente de presión) y otra dinámica (producto de la viscosidad por el laplaciano de la velocidad) (1.18)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{f}_m \quad (1.18)$$

1.2.4 Ecuación de la Energía

El primer principio de la conservación de energía establece que en un sistema la energía que entra es igual a la energía que sale más la variación interna del sistema, de esta forma podemos evaluar la energía total por unidad de volumen de una partícula fluida como en la figura 1.1. se puede expresar como: $\rho(\vec{x}, t) \cdot (\vec{e}(\vec{x}, t) + \frac{1}{2} v^2(\vec{x}, t))$, donde “e” es su energía interna específica por unidad de masa y “v²/2” su energía cinética o mecánica por unidad de masa, al aplicar el principio de conservación de energía, Durán (2017) tenemos:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_f} \rho (e + \frac{1}{2} v^2) dV = \int_{V_f} \vec{f}_v \cdot \vec{v} dV + \int_{S_f} \vec{f}_n \cdot \vec{v} dS + \int_{S_f} q_n dS + \int_{V_f} Q_r dV \quad (1.19)$$

Donde,

\vec{f}_v fuerza por unidad de volumen que actúa en la partícula

\vec{f}_n fuerza por unidad de superficie que actúa sobre un elemento ds de S_c

q_n flujo de calor normal a la superficie, por unidad de superficie

Q_r fuente de energía, generación por unidad de volumen

Al aplicar el teorema de Transporte (1.2) y expresamos las fuerzas normales a la superficie en función del tensor de esfuerzos (1.6), obtenemos la forma integral de la ecuación de la conservación de energía (1.20)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V_f} \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) dV &= \int_{V_f} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] dV + \int_{S_f} \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \\ &= \int_{V_f} \rho \vec{f}_m \cdot \vec{v} dV + \int_{S_f} \vec{v} \cdot \vec{\bar{\tau}} \cdot \vec{n} dS - \int_{S_f} \vec{q} \cdot \vec{n} dS + \int_{V_f} Q_r dV \end{aligned} \quad (1.20)$$

La ecuación integral de conservación de energía (1.21) se puede descomponer en el tensor de esfuerzos, el vector de flujo de calor \vec{q} , y el tensor de esfuerzos viscosos $\vec{\bar{\tau}}$, son formulados por las leyes de Stokes y Fourier para la obtener la ecuación diferencial de la energía (1.23) y análogamente por medio del teorema de Gauss se obtienen las ecuaciones de masa y momento (1.22). Durán (2017)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \vec{v} \right] &= \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) = \\ &= \rho \vec{f}_m \cdot \vec{v} + \nabla \cdot (-p\vec{v}) + \nabla \cdot (\vec{\bar{\tau}} \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q} + Q_r \end{aligned} \quad (1.21)$$

1.2.5 Ecuación diferencial de energía interna y cinética

La ecuación (1.10) para la energía total se divide en dos partes; la energía interna y la energía cinética.

La ecuación de energía cinética es:

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} v^2 \right) = -\vec{v} \cdot \nabla p + \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \vec{\bar{\tau}}) + \vec{v} \cdot \rho \vec{f}_m \quad (1.22)$$

Mientras que para obtener la ecuación de la energía interna es:

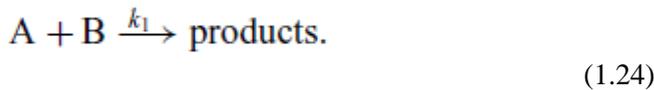
$$\rho \frac{De}{Dt} = -p \nabla \cdot \vec{v} + \vec{\bar{\tau}}^T : \nabla \vec{v} - \nabla \cdot \vec{q} + Q_r \quad (1.23)$$

1.3 Combustión

1.3.1 Introducción

El modelado matemático de flujos reactivos tiene una amplia variedad de aplicaciones en la ingeniería de procesos químicos y la ingeniería de combustión. En la ingeniería química, la mezcla de especies del combustible es muy importante para obtener la reacción deseada. Por lo tanto, se han desarrollado modelos matemáticos eficientes y confiables que pueden incorporar estos efectos de mezcla. Estos modelos pueden describir la mezcla inicial entre fluidos con precisión, siendo esto un factor muy significativo para el desarrollo del sistema. Para lo cual, CFD es una herramienta muy útil y precisa para la simulación de la combustión, tanto en la parte de discretización como en la inyección. Bengt, et al, (2012)

En el modelado de flujos reactivos se considera una sola reacción irreversible que es generada por algunos productos, esto quiere decir que:



Ahora se supone que la velocidad de la reacción química es de segundo orden con la constante de velocidad k_1 . Matemáticamente, esto se puede representar como:

$$S_A = S_B = -k_1 C_A C_B. \quad (1.25)$$

En las reacciones químicas lo que interesa no es la velocidad instantánea sino la velocidad promedio, Para esto se introduce la descomposición de Reynolds de la concentración instantánea en sus partes medias y fluctuantes. La concentración instantánea puede descomponerse como $C_\alpha = \langle C_\alpha \rangle + C'_\alpha$ que se reemplaza en la ecuación (1.21), obtenemos la siguiente expresión para el promedio de la velocidad de reacción.

$$\langle S_A \rangle = \langle S_B \rangle = -\langle k_1 C_A C_B \rangle = -k_1 (\langle C_A \rangle \langle C_B \rangle + \langle C'_A C'_B \rangle). \quad (1.26)$$

Se debe tomar en cuenta cuando haya reacciones lentas, pues estas consideran como valor cero ya que no existen fluctuaciones cuando empiecen las reacciones. Mientras que cuando existen reacciones químicas rápidas, habrá grandes fluctuaciones. Las reacciones ocurren solo cuando están presentes A y B simultáneamente, y el término $(C'_A C'_B)$ puede ser significativo.

El termino $(C'_A C'_B)$ es la analogía de la mezcla reactiva con la tensión de Reynolds $(u_i u_j)$. Por lo tanto, para una simulación de flujos turbulentos es mas complicada para tener una exacta precisión. En la figura 1.3 se puede apreciar los perfiles de concentración de las mezclas A y B respectivamente

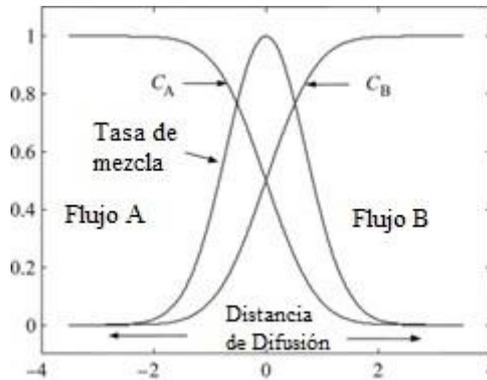


Figura 1. 3. Perfiles de concentración entre los fluidos A y B

1.3.2 Mezclas de Escala de Tiempo

Las etapas de mezcla durante los tiempos que los elementos de fluido que se deforman y reducen de tamaño durante su difusión molecular se le conoce con el nombre de micromezcla y cuando sufre la deformación y el estiramiento se le conoce como mezcla inercial convectiva. La escala de tiempo para este proceso es la inversa de la velocidad de mezcla. Por lo tanto, el modelado de las escalas de tiempo y el modelado de las tasas de mezcla son equivalentes, la escala de tiempo utilizada para describir la mezcla inercial convectiva se enuncia a continuación:

$$\tau_{IC} = \theta \frac{k}{\varepsilon}, \quad (1.27)$$

donde θ es una constante establecida en 0,5. No existe dependencia del número de Schmidt¹ ya que la viscosidad y la difusión no son relevantes. Para los gases ($Sc \approx 1$) esta escala de tiempo es suficiente para una descripción completa del proceso de mezcla.

La mezcla convectiva y viscosa son del mismo orden de magnitud, mientras que la difusión es aún demasiado lenta para interferir con $Sc \gg 1$. Esta mezcla se conoce comúnmente como mezcla viscosa-convectiva y se le determina por:

¹ (NumeroDe, 2012)

$$\tau_{VC} = 17.25 \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}}. \quad (1.28)$$

En la etapa final de la mezcla todos los gradientes espaciales desaparecen y se obtiene una mezcla homogénea. Esta escala se conoce como mezcla viscosa-difusiva y viene dado por

$$\tau_{VD} = \frac{\tau_{VC}}{0.303 + 17050Sc^{-1}}, \quad (1.29)$$

y es proporcional a la escala de tiempo viscoso-convectiva, pero con una dependencia del número de Schmidt. (NumeroDe, 2012)

1.3.3 Funciones de Densidad de Probabilidad

En el modelado de la mezcla reactiva, PDF (Función de Densidad de Probabilidad) es una herramienta muy importante para determinar una fracción de mezcla. La fracción de mezcla $\xi(x, t)$ se define para mezclas binarias (mezclas con dos entradas), cuando es uno, es para una corriente de entrada y cero para la otra. Por lo tanto, la mezcla de fracción es lógica y describe cuán grande ha sido una fracción del flujo en un punto determinado de la inyección. Considere una inyección en el centro de un flujo de una tubería turbulenta (Figura 1.4).

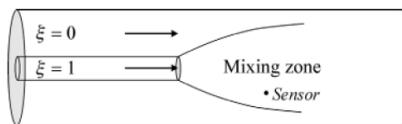


Figura 1. 4. Mezcla de flujo en una tubería

En esta figura se muestra la concentración instantánea de la fracción de mezcla en la inyección y al medir continuamente en cualquier punto de la tubería, obtendrá una serie temporal de concentraciones como se muestra en la Figura 1.4. La Figura 1.5 (a) muestra los datos con todas las características de un flujo turbulento caótico que posteriormente a través de un procedimiento de promedio se obtendrá una muestra del histograma o densidad de probabilidad de los datos como se muestra en la figura 1.5 (b)

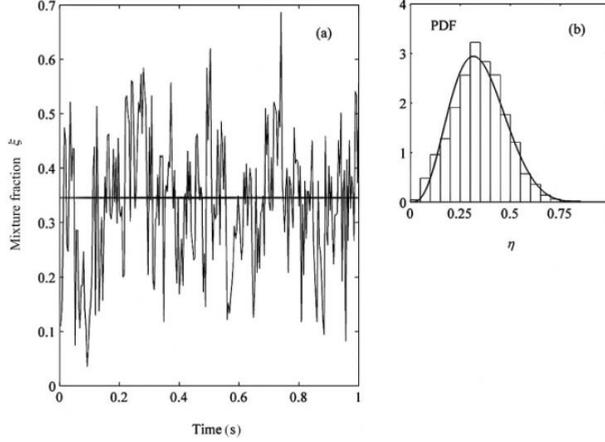


Figura 1. 5. Medición de una fracción de mezcla en un punto determinado. (a) Datos netos (b) Histograma PDF

El PDF φ se define como la probabilidad de medir una cierta concentración η del trazador

$$\varphi(\eta) d\eta \equiv \text{probabilidad de } \{\eta \leq \xi \leq \eta + d\eta\} \quad (1.30)$$

donde η es una variable de espacio de muestra para ξ . En este espacio se muestra todos los resultados posibles de un evento. Una variable utilizada para describir un solo evento en el espacio de muestra, es una variable de espacio de muestra. En el espacio de fracción de mezcla, η es la variable de espacio de muestra utilizada para describir el evento real ξ .

El espacio de muestra va desde cero hasta uno, como se muestra en la Figura 1.5 (b), ya que estos dos extremos representan mezclas puras por lo tanto la mezcla no puede tomar valores fuera de este rango. Por cada dato (bin) en el histograma de la figura 1.5 (b), $d\eta$, tiene un valor discreto de 0.05, pero para un PDF continuo $d\eta \rightarrow 0$. Por definición, la integral del PDF debe ser igual a la unidad:

$$\int_0^1 \varphi(\eta) d\eta = 1. \quad (1.31)$$

Para discretizar el histograma, la integral se define como la suma de todos los intervalos:

$$\sum_{\text{bins}} \varphi(\eta) d\eta = 1. \quad (1.32)$$

El PDF contiene toda la información de punto único de la fracción de mezcla. Dado el PDF, todos los momentos de fracción de mezcla (media, varianza, asimetría, etc.) se

pueden encontrar mediante la integración sobre el espacio de fracción de mezcla. La media ($\langle \xi \rangle$) y la varianza (σ^2) de la fracción de mezcla se definen a través del PDF como:

$$\langle \xi \rangle = \int_0^1 \eta \varphi(\eta) d\eta \quad \text{and} \quad \sigma^2 = \int_0^1 (\eta - \langle \xi \rangle)^2 \varphi(\eta) d\eta. \quad (1.33)$$

Se puede observar en la Figura 1.5 (b), la probabilidad de medir una fracción de mezcla cercana a la media es relativamente grande. Esto significa que la varianza disminuirá gradualmente hasta que la mezcla sea homogénea, de forma que la varianza sea cero y el PDF se pueda describir en una única función delta. En la Figura 1.6 se muestra la evolución del PDF para mezclar en un campo de flujo turbulento homogéneo con un presunto beta-PDF como modelo para φ (la fracción de mezcla media será constante y la varianza disminuirá exponencialmente en el tiempo).

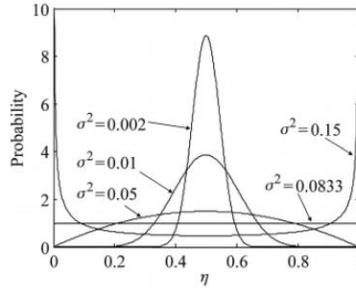


Figura 1. 6. Mezcla en la turbulencia Homogénea

El beta-PDF usa la media y la varianza de la fracción de mezcla para proporcionar una distribución continua. El beta-PDF φ_B se define como

$$\varphi_B(\eta; a, b) = \frac{\eta^{a-1} (1 - \eta)^{b-1}}{B(a, b)}, \quad (1.34)$$

Un punto y coma se usa para indicar que η , es una variable de espacio, mientras que a y b son parámetros fijos. Los coeficientes se calculan fácilmente a partir del promedio $\langle \xi \rangle$ y la varianza σ^2 como:

$$a = \langle \xi \rangle \left[\frac{\langle \xi \rangle (1 - \langle \xi \rangle)}{\sigma^2} - 1 \right], \quad b = \frac{1 - \langle \xi \rangle}{\langle \xi \rangle} a \quad (1.35)$$

y $B(a, b)$ viene dada por la función gamma Γ

$$B(a, b) = \int_0^1 s^{a-1} (1 - s)^{b-1} ds = \frac{\Gamma(a) \Gamma(b)}{\Gamma(a + b)}. \quad (1.36)$$

El PDF del experimento casi coincide con el enunciado beta-PDF. Este concepto se ha utilizado para los flujos reactivos, sin embargo, todavía no existe una justificación teórica para usar el beta-PDF, pero se sabe que da una muy buena interpretación de la mezcla en flujos homogéneos. Para flujos no homogéneos la precisión es mala, y no es una buena aproximación. Los flujos no homogéneos tienen gradientes espaciales significativos de las propiedades calculadas. En general, es posible obtener flujos homogéneos solo en laboratorios o en experimentos numéricos.

El beta-PDF es el más utilizado incluso para flujos no homogéneos. La ventaja con el beta-PDF es que es una función solo del promedio ξ y la varianza σ^2 , y solo estos deben simularse para obtener el PDF. Tenga en cuenta que el beta-PDF puede ser preciso solo cuando hay dos flujos de entrada.

El presunto beta-PDF no tiene una base física, es solo una descripción conveniente de la mezcla, existen otras interpretaciones para el presunto PDF. Los más comunes son un gaussiano recortado o algún conjunto de funciones delta. Durán (2017)

1.3.4 Modelado de mezcla turbulenta

Para el modelo de mezcla, el PDF implica solo los dos primeros momentos de la fracción de mezcla, y estos momentos deben predecirse en el modelo. Las ecuaciones de transporte para cualquier momento se siguen simplemente de las manipulaciones de la ecuación de transporte para la fracción de mezcla instantánea:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + U_j \frac{\partial \xi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right). \quad (1.37)$$

En el caso más simple, la fracción de mezcla es simplemente una concentración normalizada. En la ecuación (1.40) no se puede resolver directamente, ya que U_i es desconocida, y requiere una resolución de una malla más densa para soluciones precisas. La descomposición de Reynolds de la fracción de velocidad y mezcla ($U_i = \langle U_i \rangle + u_i$ y $\xi = \langle \xi \rangle + \xi'$) seguida por el promedio de Reynolds de la ecuación resultante conduce a una ecuación que se resuelve más fácilmente, pero que contiene información solo en la fracción de mezcla promedio:

$$\frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle u_j \xi' \rangle - D \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \right). \quad (1.38)$$

En la ecuación (1.31) el primer término es la acumulación, el segundo es la convección por el flujo medio, en el tercero, es el transporte turbulento y el último es la difusión molecular que generalmente puede despreciarse ya que D es muy pequeño. La fracción de mezcla media está representada por una línea como se muestra en la Figura 1.6 (a).

La fracción de mezcla media describe las macromezclas, pero también las micromezclas que son importantes para las reacciones químicas rápidas o instantáneas.

La micromezcla a menudo se describe por la varianza de la fracción de mezcla que se definió previamente a través del PDF en la ecuación (1.33). En base a la Figura 1.6 (a), la varianza se puede interpretar como la intensidad de las fluctuaciones alrededor de la media. Las fuertes fluctuaciones significan una gran varianza. La varianza máxima que se puede lograr ocurre cuando todas las medidas son cero o unidad (los valores intermedios significan que no se ha mezclado). El valor de la varianza será igual a $\sigma^2 = \langle \xi \rangle (1 - \langle \xi \rangle)$, que a menudo se usa para la normalización. La varianza normalizada resultante se denomina intensidad de segregación I_S :

$$I_S = \frac{\sigma^2}{\langle \xi \rangle (1 - \langle \xi \rangle)}. \quad (1.39)$$

La intensidad de la segregación siempre empieza con el valor de la unidad en condiciones iniciales no premezcladas. Una ecuación de transporte para σ^2 se puede encontrar multiplicando la ecuación (1.40) por 2ξ , descomponiendo Reynolds, U_i y ξ , y luego tomando el promedio de la ecuación completa de Reynolds:

$$\frac{\partial \sigma^2}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \sigma^2}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle u_j \xi'^2 \rangle - D \frac{\partial \sigma^2}{\partial x_j} \right) - 2 \langle u_j \xi' \rangle \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} - 2D \left\langle \frac{\partial \xi'}{\partial x_j} \frac{\partial \xi'}{\partial x_j} \right\rangle \quad (1.40)$$

Para derivar la ecuación (1.40), se ha usado la ecuación (1.44) y la siguiente identidad

$$\xi \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = \frac{1}{2} \frac{\partial \xi^2}{\partial x_i}. \quad (1.41)$$

En el lado izquierdo de la ecuación (1.40) trata de la acumulación y convección y en el lado derecho, el primer término es transporte turbulento y difusión molecular, el segundo es producción debido a la interacción entre un flujo y el gradiente de la fracción de mezcla media, y el último término es dos veces la tasa de disipación escalar media, y se le denomina (N). La tasa media de disipación escalar es el análogo escalar de la tasa media de disipación de energía ε y siempre es positiva. Este término describe qué tan rápido desaparece la varianza de la fracción de mezcla debido a la difusión en las escalas más pequeñas.

La ecuación (1.40) es una ecuación exacta para la varianza de la fracción de mezcla, pero los problemas podrían surgir de su solución. La intensidad de la segregación, por definición, no puede ser mayor que la unidad. Sin embargo, con la solución de ecuación (1.40) no se puede garantizar que el límite sea respetado por lo que pueden surgir problemas debido al término de producción y al cierre del flujo de primer orden ($u_j \xi'$). Para este problema existe una solución, en lugar de resolver para la ecuación (1.40), se puede resolver por el equivalente segundo momento bruto σ^2 . El segundo momento bruto se define como el segundo momento alrededor de cero

$$\sigma_R^2 = \langle \xi^2 \rangle = \int_0^1 \eta^2 \varphi(\eta) d\eta. \quad (1.42)$$

Una ecuación de transporte para σ_R^2 se puede encontrar exactamente por el mismo procedimiento que para la ecuación (1.43), pero sin descomposición de ξ . La ecuación resultante es

$$\frac{\partial \sigma_R^2}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \sigma_R^2}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle u_j \xi^2 \rangle \right) - D \frac{\partial \sigma_R^2}{\partial x_j} - 2D \left\langle \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right\rangle. \quad (1.43)$$

Al implementar la ecuación (1.39) en lugar de la ecuación (1.43) no tendrá ningún problema de realizabilidad ya que no hay producción involucrada. También asegura que la intensidad de la segregación comienza en la unidad. Para obtener la varianza central del momento bruto, simplemente se aplica la siguiente fórmula:

$$\sigma^2 = \sigma_R^2 - \langle \xi \rangle^2. \quad (1.44)$$

En las ecuaciones (1.38), (1.40) y (1.43), se requiere el cierre para $\langle u_j \xi' \rangle$, $\langle u_j \xi'^2 \rangle$, $\langle u_j \xi^2 \rangle$ y $\langle N \rangle$. Los tres primeros términos son flujos, por lo tanto, se requiere que conserven la media durante el transporte. La única forma de lograr esto es a través de modelos de difusión de gradiente o derivando ecuaciones de transporte para los flujos. En ingeniería solo se emplea la primera opción. Los cierres para los flujos se convierten así:

$$\langle u_j \xi' \rangle = -D_T \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j}, \quad (1.45)$$

$$\langle u_j \xi'^2 \rangle = -D_T \frac{\partial \sigma^2}{\partial x_j} \quad (1.46)$$

$$\langle u_j \xi^2 \rangle = -D_T \frac{\partial \sigma_R^2}{\partial x_j}. \quad (1.47)$$

Aquí D_T es la difusividad turbulenta, que se calcula como

$$D_T = \frac{\nu_T}{Sc_T}. \quad (1.48)$$

La forma exacta de D_T dependerá del modelo de turbulencia utilizado para ν_T . La turbulencia del número Schmidt Sc_T varía entre aproximadamente 0,5 y 1,5; pero con mayor frecuencia se establece en 0,7. El valor cercano a la unidad de Sc_T significa que el transporte turbulento (macromezcla) de momento y especie es casi idéntico para la mayoría de los flujos. Mientras que los cierres de gradiente (1.45) - (1.47), están

relacionados con la hipótesis de Boussinesq² utilizada para el modelado de las tensiones de Reynolds.

Los modelos cerrados para la fracción de mezcla promedio, la varianza y la varianza bruta se obtienen como

$$\frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D + D_T) \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \right) \quad (1.49)$$

$$\frac{\partial \sigma^2}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \sigma^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D + D_T) \frac{\partial \sigma^2}{\partial x_j} \right) + 2D_T \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} - 2D \left\langle \frac{\partial \xi'}{\partial x_j} \frac{\partial \xi'}{\partial x_j} \right\rangle. \quad (1.50)$$

$$\frac{\partial \sigma_R^2}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \sigma_R^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D + D_T) \frac{\partial \sigma_R^2}{\partial x_j} \right) - 2D \left\langle \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right\rangle \quad (1.51)$$

El término más importante para cerrar en la mezcla turbulenta es la tasa de disipación escalar media. En la Figura 1.3, se puede apreciar la tasa de disipación escalar instantánea. Cuando se muestrea la disipación escalar instantánea en el mismo punto durante un período de tiempo suficientemente largo, obtenemos la media. Tenga en cuenta que la tasa de disipación escalar media es el único término, además del transporte, que requiere el cierre para problemas de mezcla turbulenta. En la tasa de disipación escalar se observa qué tan rápido ocurre la mezcla final a pequeña escala, o qué tan rápido se obtiene una mezcla homogénea. En la Figura 1.3, se observa la interfaz entre dos fluidos sometidos a mezcla. La tasa de disipación escalar se define como la difusividad molecular multiplicada por el cuadrado del gradiente del escalar:

$$N = D \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j}. \quad (1.52)$$

La magnitud del gradiente escalar es mayor en el centro de la interfaz, aquí es donde la mezcla será más rápida por lo tanto la tasa de reacciones químicas alcanzará su punto máximo. Bengt, et al, (2012)

La disipación escalar es más difícil de cerrar para los líquidos que los gases, ya que existe una gran separación de escalas y cualquiera de las mezclas inercial-convectiva, viscoso-convectiva y viscosa-difusora puede limitar la velocidad. Los cierres más simples para (N) emplean un cierre de frecuencia de mezcla

$$\langle N \rangle = \frac{\sigma^2}{2\tau}, \quad (1.53)$$

donde τ generalmente se calcula como las escalas de tiempo de inercia-convección definidas en la ecuación (1.30). Si este método para predecir (N) es demasiado impreciso, es posible obtener una mayor exactitud derivando una ecuación de transporte exacta para (N).

Una inyección en una tubería, Figura 1.5, la turbulencia en el centro de un flujo inyectado ingresa con remolinos cuyos tamaños están determinados por el radio del tubo de inyección. Esta tubería es mucho más pequeña que el radio de la tubería exterior, que determina los remolinos más grandes en el flujo principal. En consecuencia, cerca de la inyección habrá una región de transición donde se produce la varianza y la escala de mezcla más grande se aproxima a la del flujo principal. Para describir esta región de transición, se debe emplear un modelo dinámico de múltiples escalas. Bengt, et al, (2012)

1.4 Cambio de Fase del Flujo

1.4.1 Introducción

En el cambio de fase se va a considerar como flujos bifásicos, el régimen diluido (agua vapor) y el régimen denso (agua líquida). En el régimen diluido, el espacio entre las partículas o gotitas es bastante grande, por lo que su comportamiento se rige por las fuerzas de fase continua (fluido). En los sistemas de fase densa, el espaciado es menor, por lo que las interacciones entre partículas suelen ser muy importantes. Los flujos con un espaciado de menos de diez diámetros de partícula se consideran densos.

1.4.2 Modelos Computacionales

Existen diferentes tipos de modelos para representar los flujos multifásico, a continuación, se enumeran algunos de estos

- El modelo de Eulerian
- La mezcla o el modelo de deslizamiento-algebraico
- El modelo de volumen de fluido (VOF)

1.4.2.1 Modelo Eulerian

El modelo Eulerian es uno de los modelos más completo, cubre un amplio campo de flujos Multifase en su aplicación, ya que resuelve para cada fase que participa en flujo, las ecuaciones de conservación, para después acoplarlas entre sí, debido a que todas

comparten el mismo campo de presiones. Las características del modelo Eulerian son las siguientes:

1. Un campo único de presiones compartido por todas las fases.
2. Las ecuaciones de continuidad y momento son resueltas independientemente para cada fase.
3. Existen varias funciones disponibles para el cálculo de coeficiente de arrastre, sustentación y turbulencia, para modelizar gran variedad de régimen Multifase.
4. Los modelos de viscosidad k-ε y k-ω son disponibles y aplicables de forma independiente a cada una de las fases

Limitaciones del modelo

1. El cálculo de turbulencia por medio del método de Tensor de Reynolds, no está disponible en el cálculo de la turbulencia para cada fase
2. Fluidos inmiscibles.
3. Fusión y solidificación.
4. Seguimiento de trayectoria en flujos particulados.

1.4.2.2 El modelo de mezcla

El modelo a implementarse en la simulación es el de mezcla, debido a que este modelo es muy fuerte en el acoplamiento de las fases y su velocidad relativa está en equilibrio, es decir, deben acelerarse juntas. Con el modelo de mezcla se resuelve un conjunto de ecuaciones, pero las incógnitas son las propiedades de flujo de la mezcla, no las de las fases individuales. Estas propiedades se pueden reconstruir con un modelo algebraico para la velocidad relativa, y se le conoce como modelo de deslizamiento algebraico. La velocidad relativa de las fases individuales de la velocidad media se llama velocidad derivada y se expresa $U_{i,dr,k}$ para la fase k, y la velocidad relativa a la fase continua es la velocidad de deslizamiento. La ventaja de emplear el modelo de mezcla es que solo se computa un conjunto de ecuaciones, lo que conduce a una disminución significativa del esfuerzo computacional en comparación con el modelo completo de Euler. Este conjunto de ecuaciones se da como

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_m U_{i,m})}{\partial x_i} = 0, \quad (1.54)$$

$$\frac{\partial(\rho_m U_{i,m})}{\partial t} + \frac{\rho_m \partial(U_{j,m} U_{i,m})}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij,m}}{\partial x_j} + \rho_m g_i - \frac{\partial \sum_k \alpha_k \rho_k U_{i,dr,k} U_{j,dr,k}}{\partial x_j}, \quad (1.55)$$

donde el subíndice m representa la propiedad de la mezcla y $U_{i,dr,k}$ la velocidad derivada de la fase k, de modo que

$$U_{i,k} = U_{i,dr,k} + U_{i,m}. \quad (1.56)$$

El último término en la ecuación (1.55) surge del término inercial no lineal en las ecuaciones de Navier-Stokes, que puede escribirse como el segundo término en el lado izquierdo más el último término en el lado derecho en la ecuación. (1.55), ya que

$$\frac{\partial \sum_k \alpha_k \rho_k U_{i,k} U_{j,k}}{\partial x_j} = \frac{\rho_m \partial (U_{i,m} U_{j,m})}{\partial x_j} + \frac{\partial \sum_k \alpha_k \rho_k U_{i,dr,k} U_{j,dr,k}}{\partial x_j}. \quad (1.57)$$

Las propiedades de la mezcla generalmente se pesan por la fracción de volumen

$$\mu_m = \sum_m \alpha_k \mu_k, \quad (1.58)$$

donde la viscosidad μ_k para flujos dispersos puede estimarse utilizando el mismo modelo estándar de Euler-Euler.

Una expresión algebraica en estado estacionario basada en la ecuación (1.57) es especificada por la derivada o el deslizamiento de la velocidad para cada fase y cerrar el modelo de mezcla. Las fracciones de volumen se pueden determinar a partir de la ecuación de conservación de la continuidad para cada fase como se describe a continuación

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k \rho_k U_{i,k}}{\partial x_i} = - \sum_{l=1}^p (\dot{m}_{kl} - \dot{m}_{lk}), \quad (1.59)$$

Modelo de turbulencia de mezcla

Los modelos estándar RANS (Promedio de Reynolds en ecuaciones de Navier Stokes) y LES (Simulación Grandes Remolinos) se pueden usar para modelar turbulencias utilizando el promedio de las propiedades de densidad y viscosidad. En el modelo k- ϵ el modelo de turbulencia de la viscosidad se calcula a partir de k y ϵ de la misma manera que para el flujo monofásico con una pequeña corrección para sistemas en los que la derivada de la velocidad es grande en comparación con la velocidad de los remolinos turbulentos. El efecto de la difusión turbulenta también se agrega a la velocidad derivada.

$$(U_{i,dr,k})_{\text{turb}} = U_{i,dr,k} - \frac{\mu_t}{\sigma_t} \left(\frac{1}{\alpha_k} \frac{\partial \alpha_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \alpha_f}{\partial x_i} \right) \quad (1.60)$$

donde el número de Schmidt de turbulencia, σ_t , es del orden de 0.7.

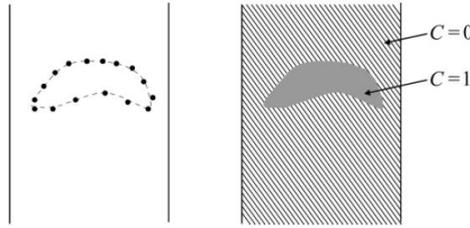


Figura 1. 7. Una burbuja ascendente, método de conjunto de niveles (izquierda) y el método de volumen de fluido (derecha).

Transferencia de calor y masa

La transferencia de calor y/o masa a menudo juega un papel importante en los flujos multifásico. Los modelos que describen la transferencia de masa y calor son típicamente bastante rigurosos y se basan en relaciones empíricas o simplificadas de los parámetros adimensionales de Sherwood o Nusselt. Las partículas al ser inertes que pueden calentarse o enfriarse, gotitas que pueden evaporarse o condensarse, partículas de combustible que pueden arder o se pueden catalizar las reacciones.

Cuando el flujo neto de una partícula es pequeño se puede estimar la transferencia de masa entre una partícula y el fluido por lo que puede estimarse usando el modelo de película. El flujo de masa viene dado [mol m⁻² s⁻¹] y se expresa como

$$N_n = k_{c,n} (C_{n,s} - C_{n,bulk}), \quad (1.61)$$

donde $C_{n,s}$ es la concentración de especies n en la superficie y $C_{n,bulk}$ es la concentración del fluido a granel que rodea la partícula

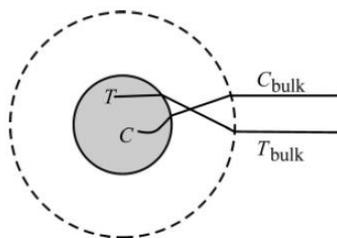


Figura 1. 8. Masa y transferencia de calor entre una partícula y un fluido a granel

El coeficiente de transferencia de masa $k_{c,i}$ es a menudo descrito por el número de Sherwood, Sh ,

$$Sh = \frac{k_{c,i} d_p}{D_i} = 2 + 0.6 Re_d^{1/2} Sc^{1/3}. \quad (1.62)$$

De acuerdo con esta correlación, la transferencia de masa entre las partículas y un fluido depende de la difusividad molecular, el tamaño de las partículas, la viscosidad y la velocidad relativa entre el fluido y las partículas. Una de las ventajas de usar CFD es que el Re_d y el Sh local se pueden obtener. Sin embargo, la evaporación, la condensación y las reacciones químicas causan un flujo neto hacia o desde la partícula que puede disminuir o aumentar la transferencia de masa y calor, y la ecuación. (1.61) se debe ajustar en consecuencia. El arrastre también se ve afectado por el flujo neto hacia y desde las partículas.

La transferencia de calor se describe de manera similar con el número de Nusselt, Nu ,

$$Nu = \frac{hd_p}{\lambda} = 2 + 0.6Re_d^{1/2}Pr^{1/3}, \quad (1.63)$$

y el balance térmico de una partícula está escrito

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_{bulk} - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_{fg} + R \Delta H + A_p \epsilon_p \sigma (T_{surr}^4 - T_p^4), \quad (1.64)$$

donde m_p es la masa de la partícula, h_{fg} la entalpía de evaporación, R es el tipo reacción y ΔH la reacción de la entalpía. En este balance hemos incluido la acumulación de calor en la partícula, la disminución en el peso de la partícula debido a la evaporación con la correspondiente pérdida de calor, el calor debido a una reacción en la partícula y la radiación que rodea la partícula.

En la ebullición, ocurren cambios de fase de condensación y cavitación por lo tanto se requiere un término adicional en la ecuación para la conservación de la masa,

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_{i,k})}{\partial x_i} = \dot{m}_k, \quad (1.65)$$

donde \dot{m}_k representa la transferencia de masa desde o hacia la fase k por unidad de volumen y unidad de tiempo.

1.4.2.3 Modelo VOF (Volume of Fluid)

El modelo VOF puede modelizar dos o mas fluidos inmiscibles, resolviendo las ecuaciones de conservación de masa para las fracciones volumétricas de cada fase secundaria. Para la fase q se tendrá:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha q} + \sum_{q=1}^n (\dot{m}_{qp} - \dot{m}_{pq}) \quad (1.66)$$

Donde

α_q es la fracción volumétrica de fase q.

ρ_q es la densidad del fluido de la fase q.

\vec{v}_q es la velocidad de fase q.

\dot{m}_{qp} es el flujo másico desde la fase q hasta la fase p, y viceversa

$S_{\alpha q}$ es el termino fuente de fracción volumétrica de fase q

La ecuación X no se resuelva para la fase primaria, su cálculo está basado en la restricción que impone la definición de fracción volumétrica.

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (1.67)$$

Posteriormente se resuelva la ecuación de conservación del momento para toda la mezcla:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (1.68)$$

Donde el primer término se expresa, en primer lugar, la variación temporal de cantidad de movimiento y, en segundo lugar, el termino convectivo. En el segundo término, las variaciones de cantidad de movimiento originadas por el gradiente de presión y el termino viscoso, las fuerzas volumétricas de gravedad y otras fuerzas que dependen de los submodelos, como sustentación y arrastre.

1.4.3 Condiciones de Límites y Fronteras

En las simulaciones de flujos multifásicos, las condiciones de contorno deben darse para cada fase en cada límite. En una entrada se especifican los datos de velocidad o una tasa de flujo másico, la fracción de volumen, temperatura. En un modelo de turbulencia para la fase continua, se especifican las propiedades de turbulencia del flujo que ingresa al dominio. De igual manera en la salida se especifica una presión o presión de referencia, temperatura y si no hay flujo de retorno ingresando a la salida, el ajuste de la mayoría de las propiedades de flujo no es muy importante. Si hay un flujo que ingresa al dominio a través de la salida, algunas de las condiciones de límite de salida pueden especificarse de manera similar a lo que se hace para una entrada.

En las paredes generalmente se especifica una condición de límite "antideslizante" para la fase continua, con funciones de muro adicionales cuando el flujo es turbulento. Las colisiones entre paredes de partículas son importantes en la mayoría de los flujos. Debido a que las colisiones entre las paredes de las partículas no son ideales, un impacto

de la pared de las partículas se asocia con una desaceleración de la partícula, que se vuelve a acelerar al volver a entrar en el flujo. Por lo tanto, un impacto de pared de partículas indirectamente extrae impulso de la fase continua, causando una pérdida de presión. Este efecto se mejora en el caso de muros "blandos".

1.4.4 Fase dispersa Lagrangiana

En las simulaciones de partículas Lagrangianas, las colisiones de las partículas en las paredes se tratan utilizando modelos similares a los de las colisiones entre partículas y partículas. Si se adopta un modelo de esfera dura, la colisión entre paredes de partículas puede disipar la energía cinética en forma de calor que puede estimarse a partir del coeficiente de restitución.

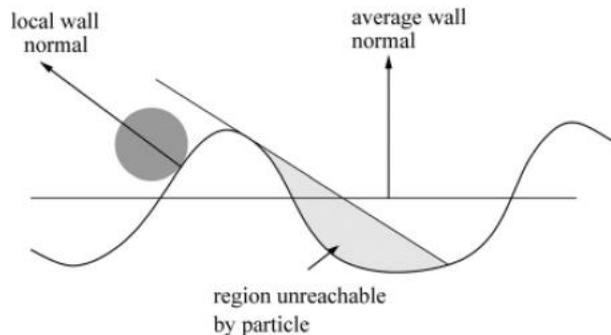


Figura 1.9. Partícula colisionando con una pared rugosa

El coeficiente de restitución se define como la relación entre la velocidad, antes y después de la colisión. Figura 1.9. Si se adopta un modelo de esfera suave, el efecto de la pared se puede describir utilizando un modelo de resorte-deslizador-amortiguador basado en la heurística o en una serie de parámetros físicos. En la aplicación de los modelos de esfera dura y de esfera suave, las propiedades de la pared no son necesariamente las mismas que las propiedades de las partículas por lo general, una pared puede tratarse como una partícula con masa y radio infinitos.

1.4.5 Paredes ásperas

Los experimentos y simulaciones han demostrado que la rugosidad de la pared puede tener un efecto considerable en el proceso de colisión de la pared con la partícula ocasionando dos situaciones. Primero, la normal de la pared puede no ser constante, esto significa que el impacto normal es en función de la rugosidad de la pared, por lo tanto, se puede modelar mediante la inclusión de un componente "aleatorio" en la parte superior del promedio a la normal de la pared. En segundo lugar, el llamado efecto de sombra, da como resultado un desplazamiento de la distribución de la rugosidad efectiva para pequeños ángulos de impacto. Ambos efectos se muestran en la Figura (1.12): (1)

la normal en la pared cambia a lo largo de esta, afectando la colisión normal; y (2) las partículas con pequeños ángulos de impacto ya no pueden colisionar con partes de la pared, lo que hace que ciertas normales de colisión sean más probables que otras.

1.4.6 Fase dispersa Euleriana

Las condiciones de contorno para las paredes en los modelos de Euler son menos obvias que en el marco de Lagrange. En la mayoría de las simulaciones, se supone que las partículas se deslizan libremente a lo largo de las paredes. Esta suposición se origina a partir de observaciones experimentales, en las cuales la mayoría de las partículas parecen moverse bastante libremente a lo largo de las paredes. A continuación, se puede especificar una condición de deslizamiento en las paredes,

$$\frac{\partial U_{i,d}}{\partial n_i} = f, \quad (1.69)$$

donde f especifica la cantidad de deslizamiento. Si $f = 0$, se obtienen las condiciones de deslizamiento libre. Por lo tanto, la convergencia se vuelve difícil para valores más altos de f .

Las condiciones de frontera para la temperatura granular en la pared pueden tener un impacto significativo en el flujo. Se encuentran disponibles varios modelos que imitan las funciones de pared para flujos turbulentos monofásicos. Estos tienen un término de producción, que tiene en cuenta el efecto de dispersión de las partículas, y un término de disipación, que explica el efecto no ideal de la colisión. En la mayoría de las simulaciones, la especificación de un gradiente cero de temperatura granular en las paredes da resultados satisfactorios.

1.5 Metodología de simulación numérica en ANSYS Fluent

En este apartado se describen los esquemas y algoritmos que utiliza Fluent para discretizar, linealizar y resolver los sistemas de ecuaciones diferenciales. Para resolver numéricamente los sistemas de ecuaciones de conservación por medio del método de volúmenes finitos MVF, se siguen los siguientes pasos:

1. Dividir el dominio en volúmenes discretos (malla)
2. Integrar las ecuaciones de conservación en cada volumen discreto para obtener el sistema de ecuaciones discreto (Discretización)
3. Linealizar las ecuaciones discretizadas
4. Resolver el sistema de ecuaciones algebraicas

1.5.1 Algoritmo de resolución

Solver Acoplado

Se resuelven las ecuaciones de conservación simultáneamente y luego las ecuaciones de turbulencia y las ecuaciones escalares como indica la figura (1.12)

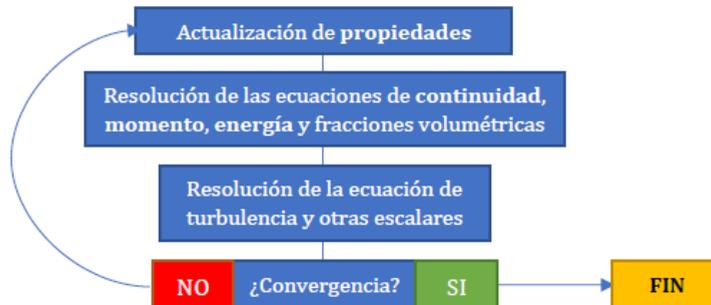


Figura 1. 10. Algoritmo Solver Acoplado

Solver acoplado utiliza la formulación implícita y explícita solo en la linealización de las ecuaciones de conservación, el resto se linealizan implícitamente.

Con la linealización implícita se resuelven todas las variables en todas las celdas mientras que en la formulación explícita, calcula simultáneamente todas las variables de celda a celda.

La resolución numérica aplicada en la simulación del caldero es la de Solver acoplado con formulación explícita, para lo cual en las opciones de procesamiento se elige el modo paralelo para aprovechar los cuatro procesadores que posee el computador. Con esta configuración los cálculos de las ecuaciones en las celdas se realizan de forma más acelerada.

1.6 Discretización Espacial e Interpolación

La ecuación (1.15) es el resultado de discretizar numéricamente para un volumen finito la ecuación de transporte (1.14). El objetivo principal es obtener la interpolación de los sistemas de ecuaciones dependientes del valor de las variables en los nodos de las celdas eliminando la dependencia del valor en las caras que los delimitan. (Durán, 2017)

A) Discretización espacial Upwind de primer orden

Asume que el valor de Φ en una cara de la celda es igual al valor de Φ del centroide de la celda adyacente a esta cara

B) Discretización espacial Upwind de segundo orden

El valor de Φ se obtiene de una progresión lineal entre el valor de Φ y el valor de la celda anexa

$$\phi_f = \Phi + \nabla\Phi \cdot \Delta\vec{s} \quad (1.70)$$

Donde

ϕ_f es el valor de Φ en la cara de la celda

Φ es el valor del centroide de dicha celda

$\nabla\phi$ es el gradiente de Φ

$\Delta\vec{s}$ es el vector director

El gradiente se le define a partir del teorema de divergencia

$$\nabla\Phi = \frac{1}{V} \sum \tilde{\phi}_f \vec{A} \quad (1.71)$$

Donde

V es el volumen de la celda

$\tilde{\phi}_f$ es el valor medio de Φ calculado, utilizando los valores de Φ en ambos centroides

\vec{A} es el vector normal a la cara cuyo modulo es su superficie. Vector área.

La discretización de primer orden su formulación es muy simple pero si el flujo Φ no es perpendicular a la cara de la celda, se genera un error de discretización por eso es recomendable que las mallas sean alineadas con el flujo por lo que favorece para su convergencia

En la discretización de segundo orden, sus resultados son más exactos, ya que interpola las variaciones del flujo Φ utilizando el gradiente, esto trae el inconveniente de no ser favorable para su convergencia. Durán (2017)

En la simulación del caldero, la discretización se realizó en “Upwind de segundo orden”, debido a la precisión de los resultados. Esto es muy importante para el desarrollo de la simulación, porque se podrá saber cuál es el comportamiento de las variables en cada uno de los puntos de la geometría.

1.6.1 Ecuaciones de estado

Para que el sistema de ecuaciones de Navier-Stokes pueda ser resuelta, en caso de existir más ecuaciones que incógnitas, es necesario completarla con las ecuaciones de estado. Çengel & Cimbala (2006)

1.7 Método de los Volúmenes finitos

Cuando se quiere obtener una solución de problemas complejos, se acude a los métodos numéricos: método de elementos finitos (MEF) o método de Volúmenes finitos (MVF). El método de **elementos finitos** es un método de aproximación de problemas continuos, por lo tanto, el continuo se divide en un número finito de partes, “**elementos**”, cuyo comportamiento se especifica mediante un número finito de parámetros asociados a ciertos puntos característicos denominados “**nodos**”, estos nodos son los puntos de unión de cada elemento con sus adyacentes. Figura 1.11.

La solución del sistema complejo sigue las reglas de los problemas discretos, el sistema completo se forma por ensamblaje de los elementos. Las incógnitas del problema dejan de ser funciones matemáticas y pasan a ser el valor de estas funciones en los nodos. El comportamiento en el interior de cada elemento queda definido a partir del comportamiento de los nodos mediante las adecuadas funciones de interpolación o funciones de forma.

El MEF, por lo tanto, se basa en transformar un cuerpo de naturaleza continua en un modelo discreto aproximado, esta transformación se denomina discretización del modelo. El conocimiento de lo que sucede en el interior de este modelo de cuerpo aproximado, se obtiene mediante la interpolación de los valores conocidos en los nodos. Es por tanto, una aproximación de los valores de una función a partir del conocimiento de un número determinado y finito de puntos.

El *método de los volúmenes finitos* permite discretizar y resolver numéricamente ecuaciones diferenciales. Es un método alternativo a los de diferencias finitas y elementos finitos. Consideremos una malla de discretización del espacio fluido. En torno a cada punto de esta malla se construye un volumen finito que no se traslapa con los de los puntos vecinos. De esta forma el volumen total de fluido resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados. La ecuación diferencial a resolver se integra sobre cada volumen de control, figura 1.11, lo cual entrega como resultado una versión discretizada de dicha ecuación. Para realizar la integración se requiere especificar perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla, de modo de poder evaluar las integrales resultantes. La principal propiedad del sistema de ecuaciones discretizadas resultante, es que la solución obtenida satisface en forma

exacta las ecuaciones de conservación consideradas, independientemente del tamaño de la malla.

En el MVF el dominio es subdividido en un número finito de volúmenes de control y las ecuaciones de control son aplicadas a cada uno de ellos. En cada volumen se toma como referencia el centroide para realizar los cálculos de las variables como son presión, temperatura, velocidad, etc., y por medio de la interpolación se puede calcularlas en las fronteras de cada volumen. Durán (2017).

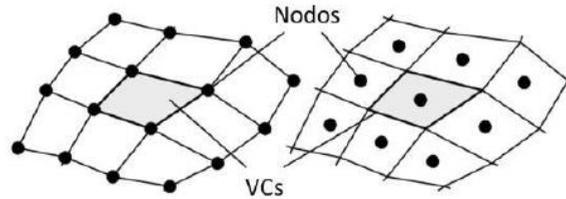


Figura 1. 11. *Nodos y volúmenes de control. Izquierda MEF. Derecha MVF*

1.8 Residuos y Convergencia

A través de una manera iterativa, Solver lleva a la solución verificando un criterio de convergencia. Cada proceso debe converger hacia una solución, por lo tanto, cada iteración es una solución próxima a la solución real.

Los denominados “residuos” son una herramienta para controlar la convergencia, esto significa que cuando un sistema tiende a converger los residuos disminuyen progresivamente, mientras que si los residuos aumentan es posible que no converja.

Fluent calcula una solución para cada paso de tiempo, por lo tanto, se tendrá una evolución de residuos que comenzará en el siguiente paso de tiempo.

Una vez linealizadas las ecuaciones, adquieren la forma de la ecuación (1.15) donde a_n y a_{nb} son los coeficientes de Φ en el centroide y caras respectivamente y el residuo escalado se define en la ecuación (1.16) representando el error relativo originado en el cálculo de la variable Φ .

$$a_p \Phi_p = \sum_{nb} a_{np} \Phi_{np} + b \quad (1.72)$$

$$R^\Phi = \sum_{celdas} \left| \sum_{nb} a_{np} \Phi_{np} + b - a_p \Phi_p \right| / \sum_{celdas} a_p \Phi_p \quad (1.73)$$

Teóricamente un residuo debe descender progresivamente conforme se realizan las iteraciones, se puede dar el caso que exista una oscilación y converja, pero esto no significa que sea la solución correcta y estos errores se puedan seguir acumulando.

El criterio de convergencia es el requisito que impone el usuario para determinar la calidad de simulación, para esto se limitan los residuos a valores aceptables, esto es que a cada variable se le asigna un residuo máximo, al comenzar el proceso interactivo siendo los residuos más inferiores por lo que se puede decir que el código ha convergido bajo ciertos criterios. Durán (2017).

CAPÍTULO 2

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL CALDERO PIROTUBULAR VERTICAL POR MEDIO DE ANSYS WORKBENCH FLUENT

2.1 Introducción

El análisis computacional del Caldero Piro-tubular Vertical se va a realizar mediante un software de simulación CFD, el cual, con los resultados obtenidos se van a poder validar los resultados del experimento. Mientras que para las diferentes figuras ilustrativas se va a utilizar los softwares de AUTOCAD e INVENTOR, pero en el diseño de la geometría se va a utilizar Desing Modeler de ANSYS. Hay que recalcar que para este tipo de simulación debido a los pocos recursos computacionales de hardware se ha procedido a simplificar la geometría de la cámara de cambio de fase, para lo cual se analizó la simetría de la geometría, estableciéndose en dos partes iguales.

Para la simulación del caldero, su desarrollo se ha dividido en dos fases, la primera, es la combustión, que se realiza en una cámara o también llamada hogar, en donde se va a producir la ignición de combustible, y el calor generado es el que será aprovechado en la cámara de cambio de fase del agua. La segunda, consiste en la transformación del agua a vapor, para lo cual se aprovecha el flujo calorífico que es transmitido a través de las tuberías y la pared superior de la cámara de combustión.

2.2 Funcionamiento del Caldero

El funcionamiento del caldero inicia, cuando en la cámara de combustión se produce la ignición, inmediatamente el calor generado, es transmitido a la pared y tuberías de la cámara de cambio de fase, en donde se encuentra el agua. Por medio de la conducción de calor, el agua cambia de fase y se transforma en vapor, hasta llegar a una presión de 4 Bar, en donde el sistema se apaga automáticamente. Mientras que los gases de chimenea son evacuados a través de la tubería de escape.

El vapor al ser utilizado; la presión en la cámara de cambio de fase empieza a disminuir, y cuando su valor llega a los 3 Bar, el ciclo automáticamente se inicia.

A continuación, en la Figura 2.1 se pueden apreciar los diferentes componentes del caldero para su funcionamiento

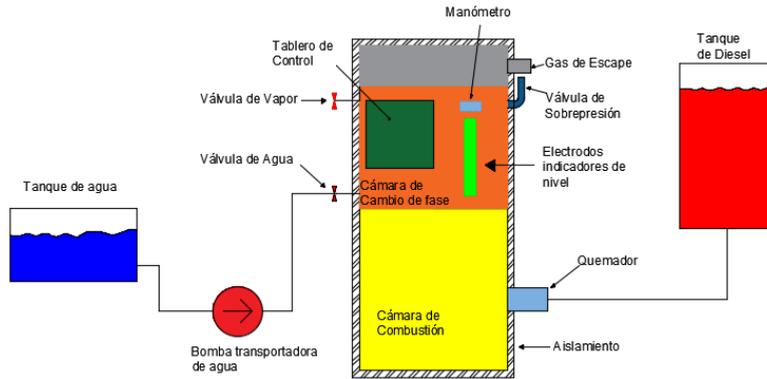


Figura 2. 1. Componentes para el funcionamiento del Caldero Pirotubular Vertical

2.3 Descripción del Caldero

El caldero es Pirotubular (aire caliente circula por los tubos) en posición vertical. En la cámara de combustión sus medidas son: el diámetro mide 470 mm con una altura de 680 mm figura (1.2), mientras en la cámara de cambio de fase sus medidas son de 470 mm de diámetro por 430 mm de altura, esto corresponde a la parte neta donde se realiza el proceso de combustión y cambio de fase, sin considerar el aislamiento. La cantidad de tubos por donde circula el flujo de aire caliente son de 44, con un diámetro de 38 mm cada uno.

El quemador se encuentra situado a 360 mm de la base, para lo cual se tiene una cavidad con un diámetro de 120 mm para su acople. A continuación, se observa en la figura 2.2 las dimensiones.

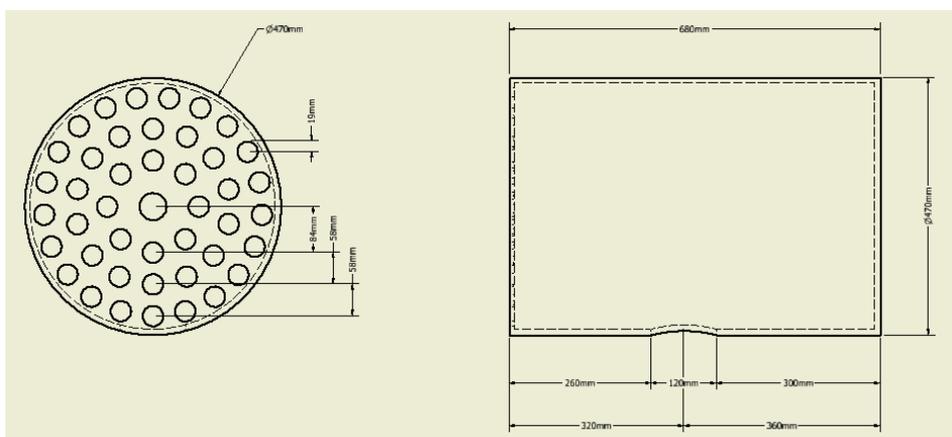


Figura 2. 2. Dimensiones de la Cámara de combustión, vista de Planta y vista Lateral

Y en la figura 1.3 se puede ver las cotas de la cámara de combustión

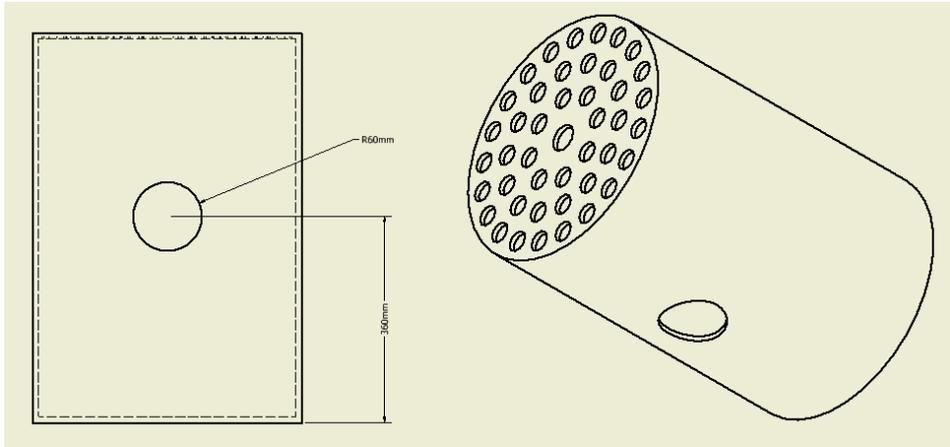


Figura 2. 3. Dimensiones de la Cámara de combustión, vista frontal y vista isométrica

Para la cámara de cambio de fase, la figura 2.4. indica sus cotas y la distribución de los tubos. Estos tubos no están dispuestos de una manera uniforme, sin embargo, existe una sección que si es simétrica y será utilizada cuando se simplifique la geometría.

En la figura 2.5 se tiene una perspectiva isométrica de la cámara de cambio de fase, en la que se puede apreciar la distribución de los tubos en la cámara.

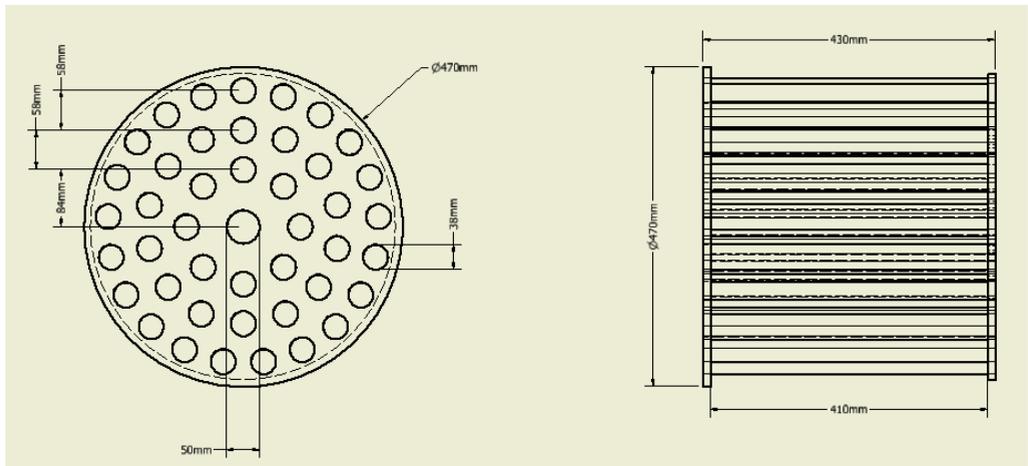


Figura 2. 4. Dimensiones de la Cámara de Cambio de Fase, vista Superior y vista Lateral

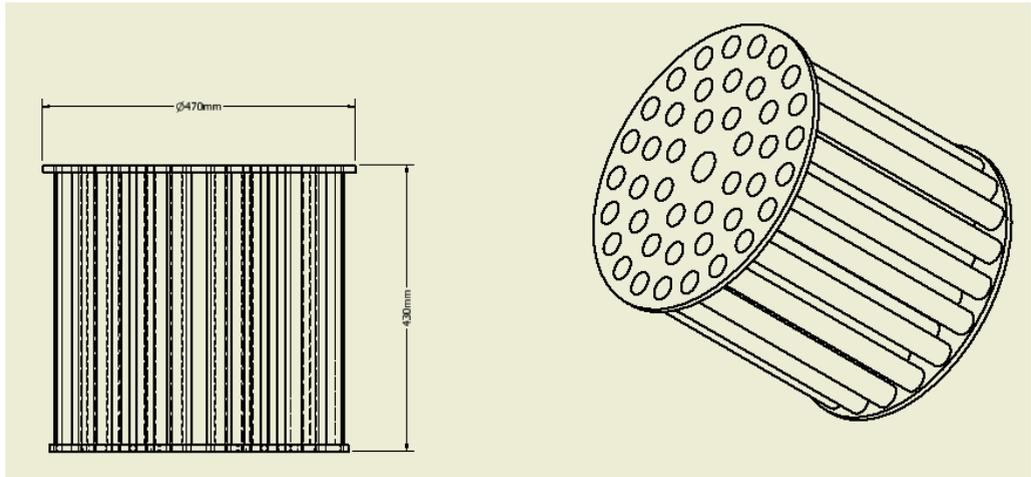


Figura 2. 5. Dimensiones de la Cámara de Cambio de Fase, vista Frontal y vista Isométrica

2.4 Simulación del Caldero por medio del Software ANSYS Workbench

Si bien el software de ANSYS, posee valiosas herramientas para realizar las simulaciones, la versión 15 que se utiliza no posee la utilidad de realizar la simulación de dos partes simultaneas, como son la combustión y el cambio de fase conjuntamente, por lo que se ha procedido a realizar indistintamente el análisis de las dos simulaciones.

En la cámara de combustión y la cámara de cambio de fase, se utilizan diferentes modelos para su resolución, sin embargo, los datos de temperatura en la pared y la tubería, obtenidos de la simulación de la cámara de combustión, son utilizados para la simulación en la cámara de cambio de fase, debido a que se trata de la misma geometría.

2.4.1 Construcción de la Geometría

Por medio de Desing Modeler se diseña la geometría del caldero. Las unidades que se establecen para diseñar, son los centímetros, y el plano XZ es donde se levantará la geometría. Para la creación de la cámara de cambio de fase se genera un círculo con diámetro 45 cm y se le extruye 43 cm en el eje Y, y para la creación de los tubos, primero se crea un círculo en el origen con un diámetro de 5 cm luego se toma la distancia del origen a 8.4 cm en el eje X y se crea el segundo círculo de 3.8 cm de diámetro, para el tercer círculo se toma como referencia el punto central del círculo 2 y en el mismo eje, a una distancia de 5.8 cm se crea el siguiente círculo con un diámetro de 3.8 cm, de la misma forma se crea el círculo cuarto, se toma como referencia el centro del círculo 3,

se da una distancia de 5.8 cm y se dibuja círculo 4 con un diámetro de 3.8 cm. Se extruyen los 4 círculos con una longitud de 43 cm en el eje Y. A través del comando “Pattern” se elige el modo circular y la cantidad de elementos es 7 para el círculo 2, dando un total de 8 tubos, para el círculo 3 también se elige el modo “Pattern”, con la cantidad de 13 elementos dando un total de 14 tubos, y para el círculo 4 se eligen 20 elementos, dando un total de 21 tubos. La cantidad de tubos generados es de 44 los cuales por medio del comando “Cut Material” genera cavidades como se puede observar en la figura 2.8. que simulará la salida del CO₂.

Además, se crea un pequeño orificio de 0.38 cm de diámetro en el eje Z, ubicado en la pared de la geometría a una altura de 37 cm, que será por donde se simule la salida de vapor.

Para la creación de la cámara de combustión se crea un nuevo sketch y con un círculo de 45 cm se extruye en sentido inverso con una longitud de 67 cm. Para la creación de los tubos se toma como referencia los creados en la cámara de cambio de fase y se procede a dibujar, luego se les extruye y por medio del comando “Pattern” se genera la misma cantidad y ubicación de los tubos como se muestra en la figura 2.7. Para la creación del ingreso de combustible y de aire se crean dos círculos en la pared extruida de la cámara de combustión en el eje X a una altura de 35 cm con los diámetros de 1 cm para el combustible y de 4 cm para el aire. Para seleccionar los dominios se utiliza el comando “face split”.

A continuación, en la figura 2.6 se muestra la geometría generada en Desing Modeler del caldero a simular

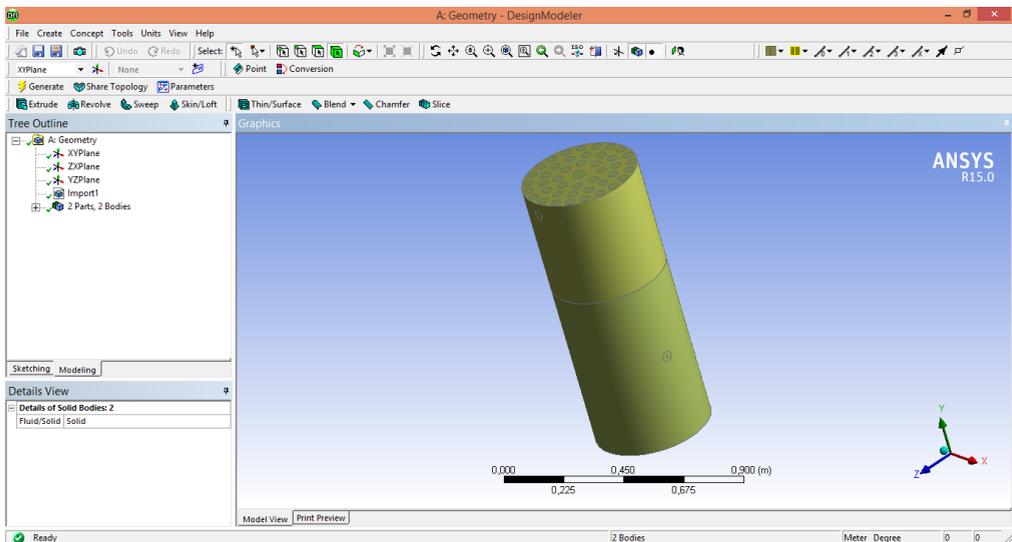


Figura 2. 6. Geometría de la cámara de Combustión (parte inferior), cámara de cambio de fase (parte superior), realizado en “Desing Modeler”

2.4.2 Simplificación de la Geometría

En la cámara de combustión se simplificó el sistema del quemador, se lo sustituyó por las zonas de ingreso de combustible y de ingreso de aire, estos se encuentran representados por los círculos en la figura 2.7. a una altura de 35 cm en la pared.

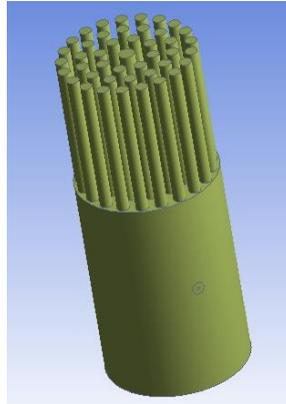


Figura 2.7. Cámara de combustible simplificado

Para la geometría de la cámara de cambio de fase, se realizó la simplificación de la figura 2.8 a), por la figura 2.8 b). Este procedimiento se realiza para reducir los consumos computacionales. Para realizar la simplificación se consideró que las partes sean simétricas, de manera que el resultado sea el mismo para ambas partes.

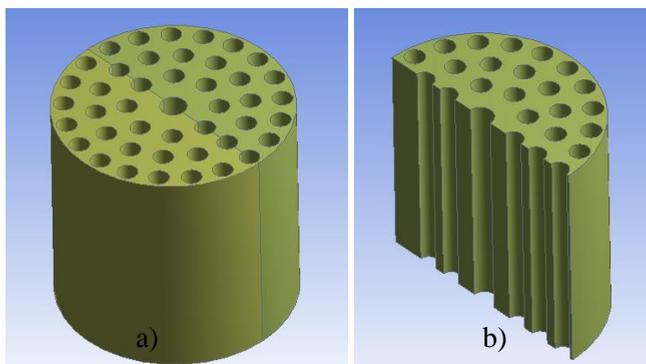


Figura 2. 8. Cámara de Cambio de Fase simplificada

2.4.3 Mallado del Caldero

Para realizar el mallado existen varias herramientas dentro del software de CFD, para lo cual, se debe considerar el tipo, tamaño y distribución de los elementos del mallado. Estas pueden ser modificadas en la ventana de propiedades.

Dentro de las propiedades, uno de los criterios para realizar el mallado, es que la ortogonalidad se encuentre muy cerca de la unidad mientras que la oblicuidad debe ser muy cercana a cero, por lo tanto, al tener una malla con estas condiciones la posibilidad de una convergencia es muy alta.

En la geometría a analizar se aplicó un centro de relevancia (Relevance Center) “Fine” y el suavizado (Smoothing) en “High” y la cantidad de nodos obtenida es 199528 y la cantidad de elementos generados es 928289 como se muestran en las figuras 2.9

Details of "Mesh"	
Triangle Surface Mesher	Program Contro...
Patch Independent Options	
Topology Checking	Yes
Advanced	
Defeaturing	
Statistics	
Nodes	199528
Elements	928289
Mesh Metric	Orthogonal ...
Min	0,277216330352...
Max	0,995888211205...
Average	0,859074963467...
Standard Deviation	8,132625166001...

Figura 2. 9. Numero de Nodos y Elementos al ser mallado la cámara de combustión

A continuación, se puede apreciar la malla de la cámara de combustión, como resulta al implementar los detalles de mallado. figura (1.10)

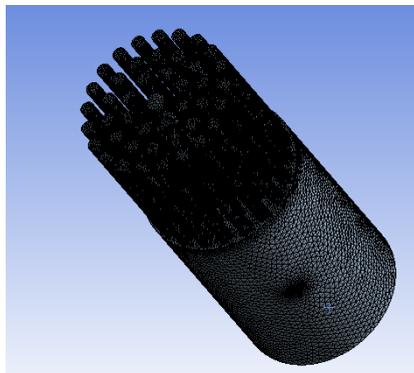


Figura 2. 10. Malla de la cámara de Combustible

El mismo procedimiento se utiliza para la generación de la malla de la cámara de cambio de fase. En la figura 2.11, se puede observar la cantidad de nodos y elementos generados

Details of "Mesh"	
[-] Patch Conforming Options	
Triangle Surface Mesher	Program Controlled
[-] Patch Independent Options	
Topology Checking	Yes
[+] Advanced	
[+] Defeaturing	
[-] Statistics	
<input type="checkbox"/> Nodes	219240
<input type="checkbox"/> Elements	209627
Mesh Metric	Element Quality
<input type="checkbox"/> Min	0,558106724223864
<input type="checkbox"/> Max	0,9993336462608
<input type="checkbox"/> Average	0,933871164006412
<input type="checkbox"/> Standard Deviation	6,80576516144018E...

Figura 2. 11. Numero de Nodos y Elementos al ser mallado la cámara de cambio de fase

La malla de cambio de fase, al determinarse las características de mallado, da como resultado la figura 2.12.

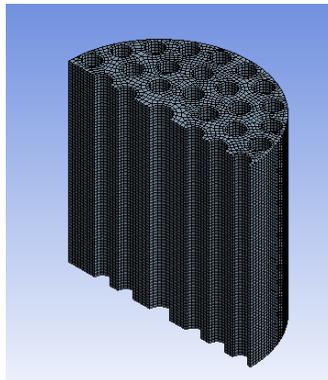


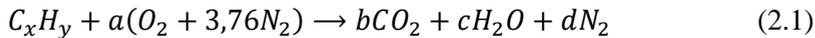
Figura 2. 12. Malla de la cámara de Combustible

2.5 Simulación de la cámara de combustión

Para la simulación de la cámara de combustión, se debe tener un conocimiento de reacciones químicas, proporciones de mezcla de combustible-aire, ecuación estequiométrica, fracciones de masa, etc. Estos conocimientos son básicos para aplicar en la ignición de combustible.

El combustible diésel en Ecuador se comercializa dos tipos, el simple y el refinado, para el experimento se escogió el diésel simple, cuya composición química es $C_{12}H_{23}$ esto significa que tiene 12 átomos de carbono y 23 átomos de hidrogeno los cuales, al ser mezclados con otros reactivos, se obtienen los productos. A esto se le conoce como la ecuación estequiométrica que es la mezcla ideal para la combustión del diésel. “Las ecuaciones químicas son el modo de representar a las reacciones químicas” (Universidad de Valladolid, s.f)

La ecuación estequiométrica del diésel es



Donde las equivalencias son

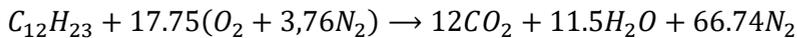
$$C_x \rightarrow x = b$$

$$H_y \rightarrow y = 2c$$

$$O \rightarrow 2a = 2b + c$$

$$N \rightarrow a \cdot 3,76 \cdot 2 = 2d$$

Al resolver las equivalencias, reemplazamos los valores obtenidos (a=17,75; b=12; c=11.5; d=66,74) en la ecuación (2.1), de tal manera que la fórmula estequiométrica del diésel queda de la siguiente manera,



Además de la formula estequiométrica existe otra relación que se debe tomar en cuenta, es la cantidad de aire con relación a la cantidad de combustible para que la ecuación estequiométrica sea la ideal. La relación de la mezcla de combustible y aire va desde 1/8 hasta 1/22, estos son los rangos para una buena mezcla, para el caso del caldero se va a establecer una relación de mezcla de 1/15 siendo un valor promedio.

Se inicia con la modificación de las unidades, para lo cual se va a trabajar con Atmosferas. En el experimento se mide en Bar, siendo su equivalente muy similar (1 Atm = 1.01325 Bar). Esto se realiza debido a que en la base de datos de ANSYS no existe las unidades de medida de presión en Bar.

Define → **Units** → **Pressure** → **Atm**

En las condiciones generales, se establece el valor de la gravedad en 9.81 m/s², el resto de datos permanece sin alterarse ya que se va a simular un régimen estacionario. Figura (2.13)

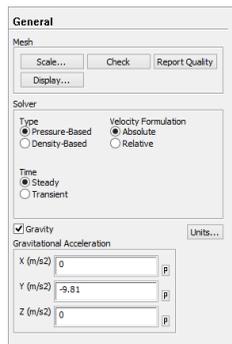


Figura 2. 13. Datos generales

Dentro del modelo a implementar, al tratarse de un sistema de intercambio de energía se necesita que esté activada la condición de energía.

Models → Energy-On.

En el modelo de viscosidad se elige k-epsilon, que es el más utilizado en la dinámica de fluidos para simular las condiciones del flujo turbulento. Tiene la característica de representar el fenómeno de la turbulencia mediante dos ecuaciones de transporte, la primera transporta la energía cinética de la turbulencia (k) y la segunda es la tasa de disipación de la energía de turbulencia (ϵ).

En el campo de las especies se activa el modelo de **Non-Premixed Combustión**, lo que permite trabajar con diferentes tipos de reacciones, en este caso se escogió el $C_{12}H_{23}$ que es la fórmula de un hidrocarburo conocido como diésel o gasóleo, y se encuentra disponible en la base de datos de ANSYS. Los reactivos necesitan de aire para la combustión, éste se encuentra distribuido según su fracción de masa en, oxígeno con el 21% y el nitrógeno con el 79%. Con estos datos establecidos se procede a generar el archivo de tabla PDF (FFF.pdf), que será el que se ejecute cuando se realice la simulación de combustión del combustible.

Models → Non-Premixed Combustión → edit

Species Model	Non-Premixed Combustión	PDF Table Creation	Boundary	$C_{12}H_{23} = 1$ $O_2 = 0.21$ $N_2 = 0.79$
			Table	Calculate PDF Table

Las zonas que van a ser consideradas para las condiciones de frontera son: el ingreso de aire, el ingreso de combustible, la pared de calor y la salida de CO_2 .

	Zone	Type				
Boundary Conditions	Ingreso aire	Mass Flow Inlet	Momentum	Mass Flow Rate (kg/s)	0.00062	
				Direction Specification Method	Normal to Boundary	
				Turbulence	Intensity and Viscosity Ratio	Turbulent Intensity(%) →10 Turbulent Viscosity Ratio→10
	Thermal	Total Temperature (k)	350			
Ingreso de Combustible	Mass Flow Inlet	Momentum	Mass Flow Rate (kg/s)	1.806e-5		
			Direction Specification Method	Normal to Boundary		

				Turbulence	Intensity and Viscosity Ratio	Turbulent Intensity(%) →10
				Thermal	Total Temperature (k)	300
				Species	Mean Mixture Fraction	1
	Pared de Calor	Wall	Momentum	Material Name	Steel	
	Salida de CO ₂	Pressure Outlet	Momentum	Direction Specification Method	Direction Vector	
				Coordinate System	Cartesian (X,Y,Z)	
				Y-Component of Flow Direction	1	
				Turbulence	Intensity and Viscosity Ratio	Turbulent Intensity(%) →10
			Thermal	Total Temperature (k)	500	Turbulent Viscosity Ratio→10

La primera condición de contorno a implementar es el **ingreso de aire** y el tipo de variable es el flujo de masa, el valor calculado de acuerdo a la sección es de 0.00062 Kg/s; este flujo de masa será proporcional con el flujo de masa de combustible. La temperatura tiene un valor de 350°Kelvin, que es el punto de ignición del diésel.

En la condición de frontera de **ingreso de combustible**, el flujo de masa se establece en 1.806e-5 Kg/s, de acuerdo con la relación de mezcla de combustible y aire. En las especies su porcentaje de combustible es el 100% por lo que se le representa con el valor de 1.

Para la condición de **salida de CO₂** se elige la presión de salida (Pressure Outlet), en la ventana de **momentum**, el método de especificación de dirección se considera el de **Vector de Dirección**, y sus coordenadas cartesianas en el eje Y, indica la dirección de salida.

En la condición de la **Pared de Calor**, se especifica el material escogido, en este caso se seleccionó un acero Steel, que es el que va a transferir la temperatura a través de la conducción.

Para que el sistema converja se reduce el margen de error de 0.001 a 0.01 de manera que el rango de los residuos sea más grande y el sistema pueda converger más pronto.

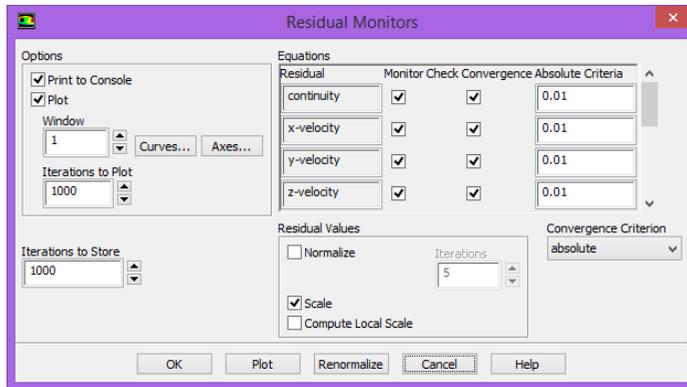


Figura 2. 14. *Valores de Convergencia*

Con los datos incorporados, se procede con el modo de inicialización para ejecutar la simulación.

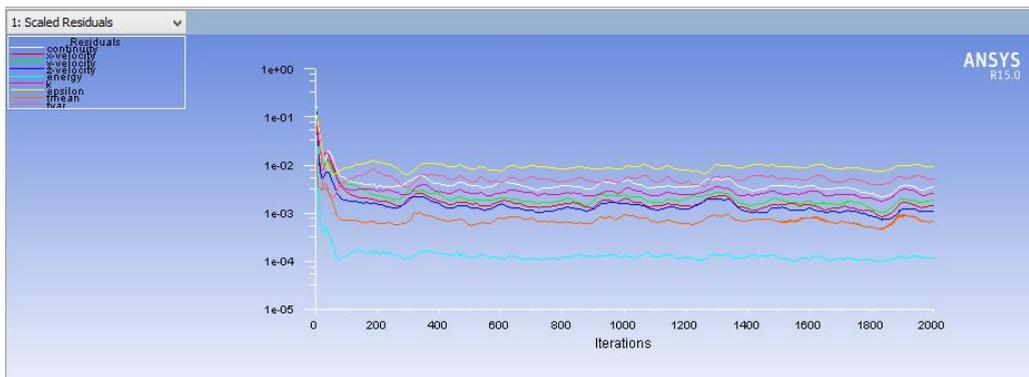


Figura 2. 15. *Iteraciones*

2.5.1 Análisis de la Cámara de Combustión

Con los resultados obtenidos en el proceso de cálculo, se van a analizar el comportamiento de las variables en el post proceso

La variable del calor total producido en la cámara de combustión, es la que se va a utilizar en la cámara de cambio de fase.

En la figura 2.16, se puede observar, cómo se encuentra distribuida la temperatura en la cámara de combustión. En la parte de la ignición de combustible, la temperatura llega hasta $1616^{\circ}\text{Kelvin}$, en el resto de la cámara el calor se distribuye hacia los diferentes puntos.

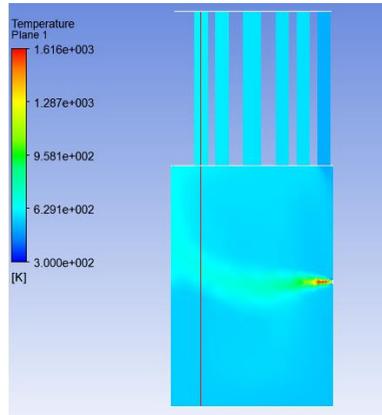


Figura 2. 16. Ignición en la Cámara de Combustión

Para una mayor referencia, en la figura 2.16 se ha trazado una línea de color rojo para identificar los valores de temperatura que se han producido en ese espacio. En la figura 2.17, se indica la curva de comportamiento de la temperatura para la línea trazada.

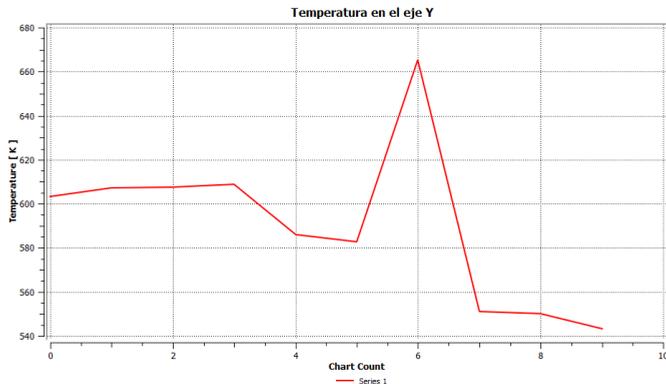


Figura 2. 17. Temperatura de la línea referencial en la Cámara de Combustión

Las corrientes de velocidad del flujo que se generan dentro de la cámara de combustión, tienen un recorrido que va desde el ingreso de combustible, hasta la salida por los tubos. La generación de vórtices y las líneas de velocidad se puede apreciar con mejor detalle en la figura 2.18.

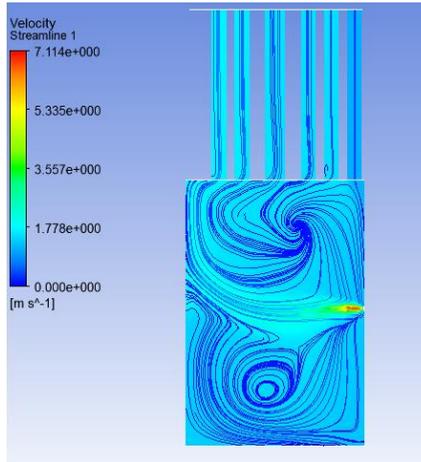


Figura 2. 18. *Vórtices en la Cámara de Combustión*

En la figura 2.19, la representación volumétrica de la temperatura se puede observar cómo se distribuye en la cámara de combustión y en la tubería. La temperatura representada de color celeste claro, se distribuye de forma simétrica respecto al plano XY.

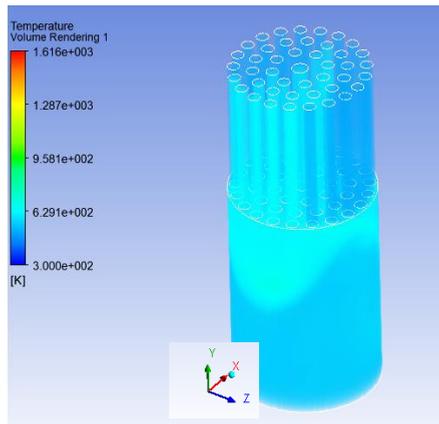


Figura 2. 19. *Representación Volumétrica de la distribución de la temperatura*

Luego de haber hecho el análisis de la cámara de combustión, se procede a generar el archivo que contendrá la información de la temperatura total de la cámara de combustión. Este archivo posteriormente será cargado en las condiciones de frontera del cambio de fase, que luego será seleccionado para condición de temperatura en la “Pared de Calor”.

Para generar el archivo se procede de siguiente forma:

File → **Export** → **Profile** → **Write Profile** → pared_calor → **Total Temperatura**

Luego, se designa el lugar donde se va a guardar el archivo y con su respectivo nombre, para su identificación. Este archivo generado, tendrá la denominación de “temp.prof”.

2.6 Simulación de la cámara de cambio de fase

En esta sección se va a simular el cambio de fase del agua en vapor, pero al ser un sistema que actúa conjuntamente con la cámara de combustión, se necesita la información de temperatura que la pared y la tubería, transmiten a la cámara de cambio de fase. Para lo cual el archivo generado “temp.prof”, será incorporado a las condiciones de frontera. A continuación, se indica el proceso para agregar el archivo en el “(Fluid Flow(Fluent))→setup”.

Boundary Conditions → **Profile** → **Profiles** → **Read** (ubicación del archivo) → **Apply** → **Close**

De esta forma, el archivo queda dispuesto para ser utilizado en las condiciones de contorno, para el dominio de “tubos_calor”.

En el preproceso de la cámara de cambio de fase, se elige el método y cargar sus datos respectivamente. En los datos generales, figura 2.20, por ser un sistema variable en el tiempo, se escoge el modo transiente, y la gravedad, se la representa en la coordenada “Y” debido a que la geometría está diseñada sobre el plano “XZ”.

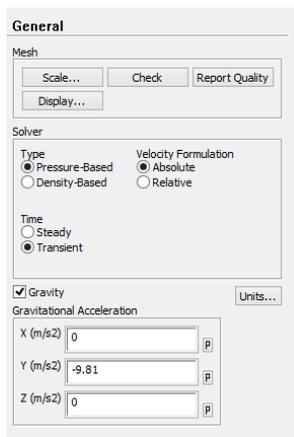


Figura 2. 20. Datos generales de la cámara de Cambio de Fase

En la configuración de la solución, existen varios métodos para la simulación de cambio de fase del agua. A continuación, se indica el modelo escogido para la simulación.

Models	Multiphase Model	Mixture	
		Implicit Force	
		Number of Eulerian Phases = 3	
	Energy Equation	On	
	Viscous Model	Model	k-epsilon
		k-epsilon model	RNG
	Near Wall Treatment	Scalable Wall Functions	

El modelo multifase escogido es de “**Mixture**”; (mezcla), ya que permite interactuar con los diferentes fluidos, para lo cual se ha seleccionado en el número de fases Euleriano con un valor de 3 (aire, agua, vapor) y se ha habilitado la casilla de la fuerza implícita del cuerpo.

Para el análisis también se va a necesitar que se active la celda de la ecuación de energía ya que las iteraciones de los fluidos generan una transferencia de energía.

En el modelo de viscosidad se elige k-epsilon, además se activa la casilla de “RNG”, debido a que se necesitan resolver las fluctuaciones turbulentas en el flujo de vapor en el sistema. También se activa la celda “**Scalable Wall Functions**”, ya que los fluidos van a estar en contacto con las superficies de la cámara de cambio de fase.

Para la elección de los materiales se recurre a la base de datos de ANSYS Workbench donde se selecciona los fluidos de agua-líquido y agua-vapor que a continuación serán configurados.

Materials	Fluid	water-liquid
		water-vapor
		air
	Solid	Steel
		Aluminum

Al seleccionar las fases de los fluidos también se selecciona el tipo de actividad que van a desempeñar, para lo cual en la fase de interacción se selecciona la masa para designar la transferencia de masa de agua a vapor y el mecanismo utilizado es la evaporación-condensación. También se considera la tensión superficial con un valor de constante de 0.072 de relación entre el agua-aire y de 0.72 vapor-aire.

Phases	aire-Primary Phase				
	agua-Secondary Phase				
	vapor-Secondary Phase				
	Interaction	Mass	From Phase	agua	365°k
			To Phase	vapor	
		Surface tension	Evaporation-condensation	Saturation temperature	
agua – aire			constant → 0.072		
	vapor – aire	constant → 0.072			

En las condiciones de zona de celda se configuran las condiciones de operación de la presión y la temperatura.

Cell Zone Conditions	Operating Conditions	Operating Pressure (pascal)	300000
		Operating Temperature (k)	393

Las condiciones de contorno, en la salida del vapor, se selecciona “**pressure outlet**” y de la misma forma en la simetría se selecciona “**Simmetry**” para indicar que la figura es la mitad de la geometría que se está simulando. Mientras que para la condición de los tubos de calor, se utiliza el archivo “temp.prof”, generado en la cámara de combustión. Este archivo contiene la información de temperatura total, que se produjo en las paredes y tubos.

Boundary Condition	Zone	Type			
	Salida_vapor	Pressure Outlet			
	Simetria	Symmetry			
	Tubos_calor	wall	Thermal	Temperature	Pared_calor total-temperatura
			Material Name	steel	

En la solución, se tiene que determinar las regiones de vapor y agua, por lo que se elige el método de inicialización “**Hybrid initialization**”, y se inicializa.

Se debe tomar en cuenta, que se está trabajando con la mitad de la geometría, por lo tanto, los valores de las coordenadas varían. A continuación, se crean las regiones.

Adap 1 → **Region** → **Region Adaption**

Input Coordinates	Xmin(m)	Xmax()	Ymin()	Ymax()	Zmin()	Zmax()
Hexa0	-0.225	0.225	0	0.3	-0.225	3.048e-33
Hexa1	-0.225	0.225	0.3	0.43	-0.225	3.048e-33
Hexa2	-0.225	0.225	0	0.43	-0.225	3.048e-33
Hexa3	-0.225	0.225	0	0.43	-0.225	3.048e-33

Luego de haber creado las regiones, por medio del “**PATCH**”, se identifica los valores de las variables. Para indicar que una zona está habilitada se la representa con el valor de 1.

Variable	Value	Register to Patch
agua	1	Hexa0
vapor	1	Hexa1
presión	300000	Hexa2
temperatura	393	Hexa3

En las actividades a calcular, figura 2.21, para el posproceso, se configura “**Autosave Every(Time Step)**”, para que se grabe cada 5 iteraciones. Las variables a ser calculadas son seleccionadas, estas son: la presión, temperatura, velocidad, turbulencia, volúmenes de fracción del aire, agua y vapor.

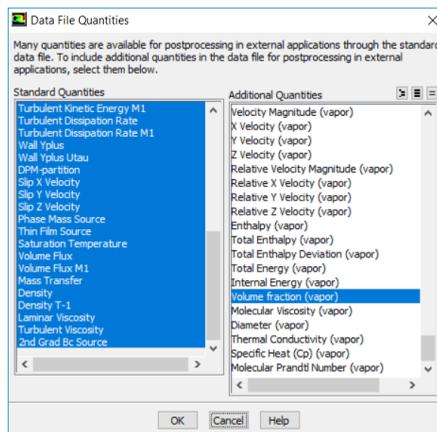


Figura 2. 21. Actividades a Calcular

Con los datos establecidos en el preproceso, se establece la cantidad de iteraciones que realizará los cálculos, para el cambio de fase del agua. figura 2.22. En “**Number of Time Steps**” se le asigna 120. Para “**Time Step Size(s)**”, el valor de 1, y para “**Max Iterations/Time Step**” se le asigna el valor de 1.

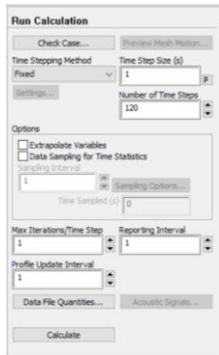


Figura 2. 22. Numero de Iteraciones para cálculo de cambio de fase

2.6.1 Análisis de la Cámara de Cambio de Fase

Con la ejecución del proceso de cálculo, se obtiene la información para ser evaluada en el posproceso. A continuación, se muestra los resultados obtenidos.

En las figuras desde la 2.23 hasta la 2.27 se indican los tiempos en los que la fracción de volumen de agua va cambiando. Los tiempos establecidos son de 0 seg, 30 seg, 60 seg, 90 seg, y 120 seg.

En el tiempo 0 seg, el agua (color rojo), se encuentra en el proceso de cambio de fase por lo tanto la fracción volumétrica no es significativa

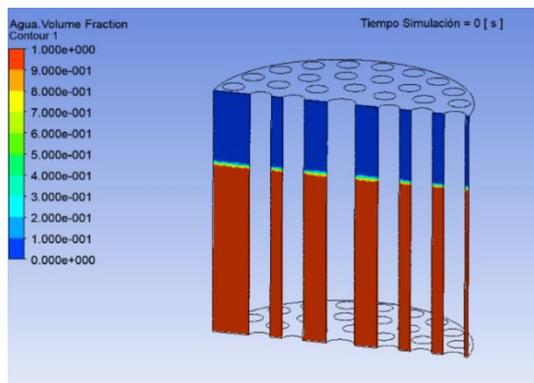


Figura 2. 23. Fracción volumétrica del agua a los 0 segundos

En el tiempo de 30 seg, se puede observar en la figura 2.24, ya se encuentra fraccionada el agua en un gran porcentaje.

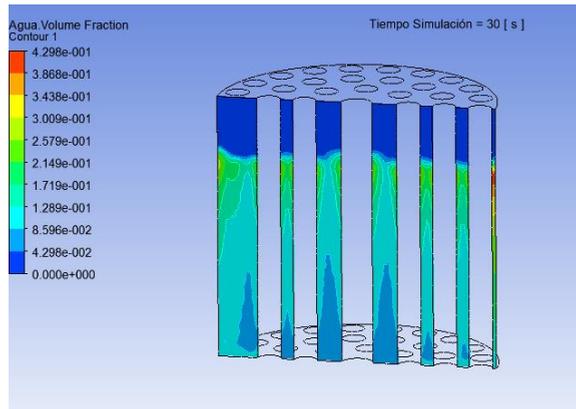


Figura 2. 24. Fracción volumétrica del agua a los 30 segundos

En el tiempo de 60 seg, en la figura 2.25, la fracción del agua sigue aumentando como se observa en la zona inferior.

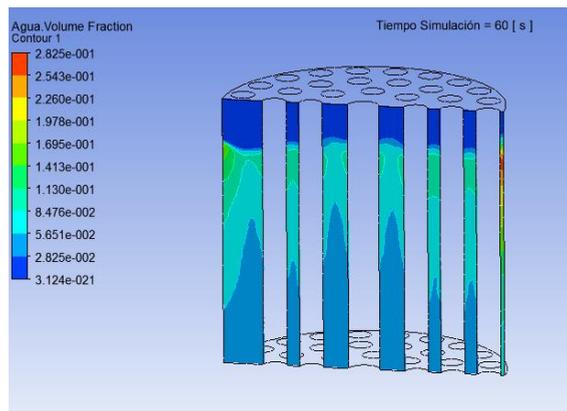


Figura 2. 25. Fracción volumétrica del agua a los 60 segundos

En el tiempo de 90 seg, en la figura 2.26, la escala de colores indica la cantidad cuanto se ha fraccionado el agua, por lo tanto, en la gráfica todavía se encuentran zonas de color rojo que no se ha fraccionado.

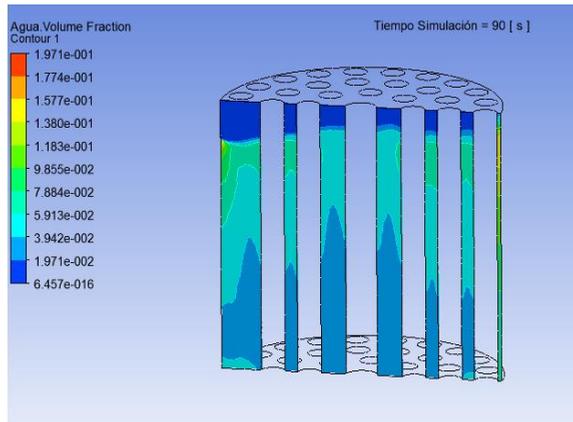


Figura 2. 26. *Fracción volumétrica del agua a los 90 segundos*

Para el tiempo de 120 seg. que es el que establece la simulación, se puede observar en la figura 2.27, que el volumen de agua se encuentra fraccionado en su mayoría,

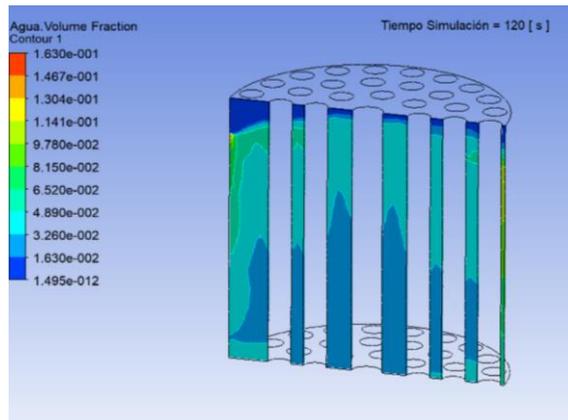


Figura 2. 27. *Fracción volumétrica del agua a los 120 segundos*

De misma manera se va a realizar el análisis de la evolución del vapor durante los tiempos de 0, 30, 60, 90 y 120 segundos.

Para el tiempo de 0 seg, en la figura 2.28, la fracción del volumen de vapor se encuentra en la parte superior (color rojo)

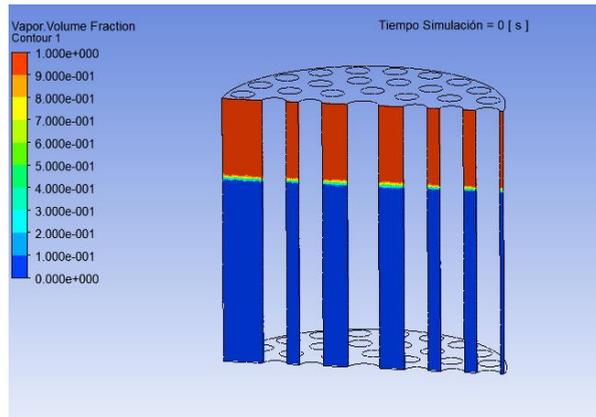


Figura 2. 28. *Fracción de volumen de Vapor en 0 segundos*

En el tiempo de 30 seg, se observa en la figura 2.29, que el volumen de vapor empieza a aumentar. Este proviene de la parte inferior, producto de la evaporación del agua.

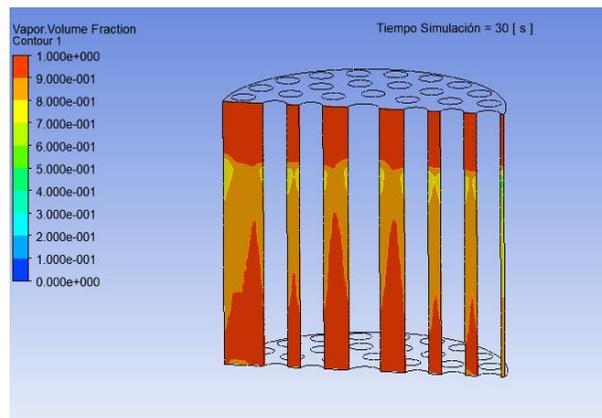


Figura 2. 29. *Fracción de volumen de Vapor en 30 segundos*

En el tiempo de 60 seg., en la figura 2.30. se visualiza que el volumen de vapor ha aumentado considerablemente, quedando pocos espacios por cubrir.

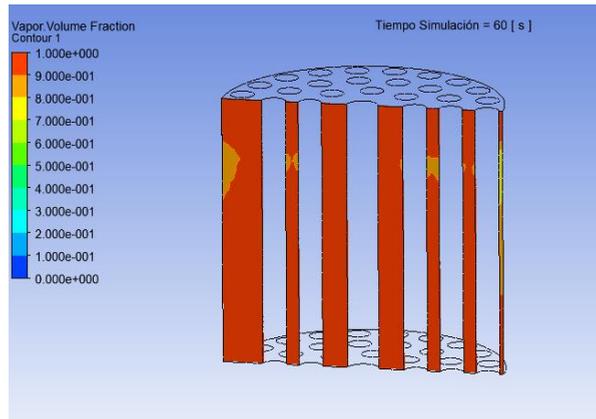


Figura 2. 30. *Fracción de volumen de Vapor en 60 segundos*

Para el tiempo de 90 seg. el volumen de vapor tiene un alto porcentaje de concentración, como se muestra en la figura 2.31.

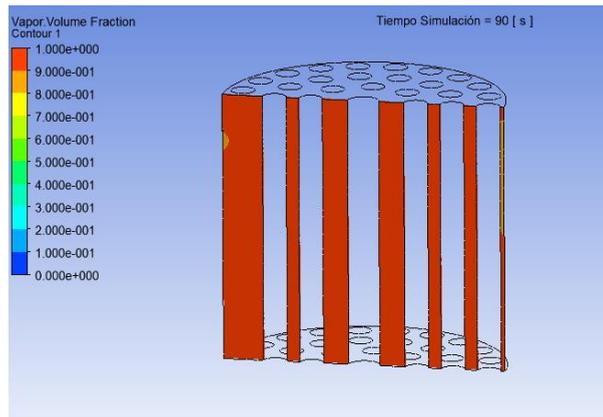


Figura 2. 31. *Fracción de volumen de Vapor en 90 segundos*

Al cumplirse los 120 seg, se puede apreciar en la figura 2.32. que el volumen de vapor está prácticamente lleno, lo que implica que al aumentar el volumen de vapor también aumenta la presión, siendo este el objetivo de la simulación.

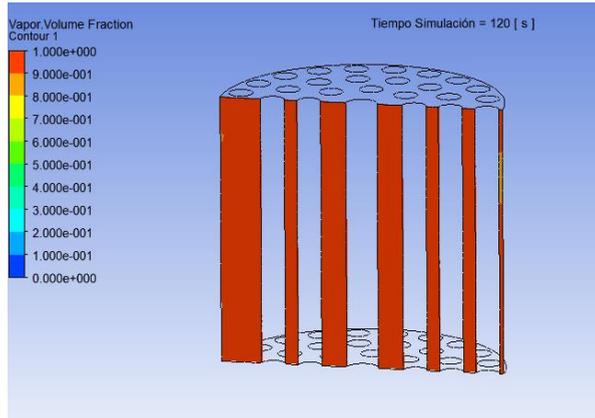


Figura 2. 32. *Fracción de volumen de Vapor en 120 segundos*

Luego de haber realizado el análisis del volumen de agua y de vapor, se procede con el análisis de la presión que se produce durante el tiempo de 120 segundos. De la misma forma se ha considerado intervalos de 30 segundos para el análisis.

En el caso de 0 seg. como se muestra en la figura 2.33, la presión con la que se inicia la simulación es de $3e+5$ Pa. En la escala de colores se indica cuáles son los valores de presión que se encuentra la cámara de cambio de fase.

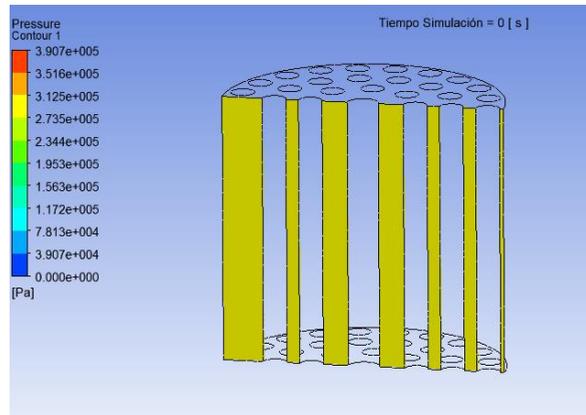


Figura 2. 33. *Presión de Vapor en 0 segundos*

En los 30 seg. de realizada la simulación se puede ver en la figura 2.34. que, basándose en la escala de colores, la cámara de cambio de fase ha tomado otro color, esto significa que la presión a aumentado.

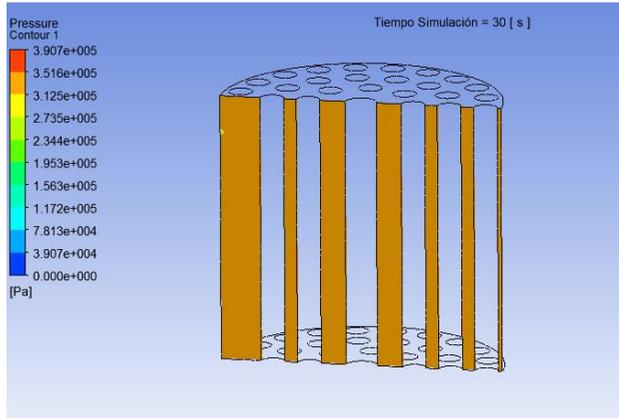


Figura 2. 34. *Presión de Vapor en 30 segundos*

Al transcurrir 60 seg. la presión del vapor sigue aumentando, en la figura 2.35 se muestra en la escala de colores que ha cambiado del color café al rojo. Por lo tanto, la presión se mantiene en la zona de color rojo, y sus valores se encuentran entre los $3.516e+5$ y $3.907e+5$ Pa.

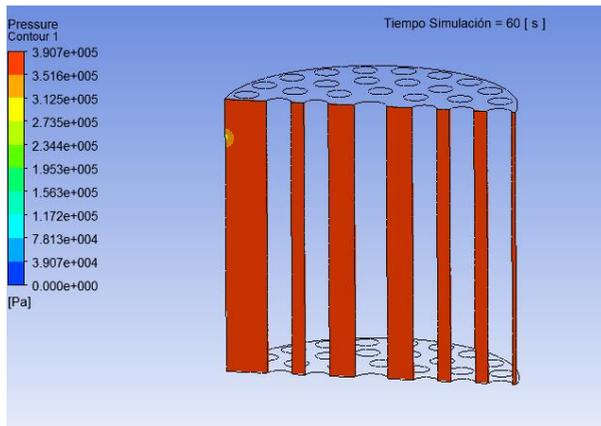


Figura 2. 35. *Presión de Vapor en 60 segundos*

A los 90 segundos de haber transcurrido el tiempo, se puede observar en la figura 2.36, que los valores de presión se mantienen en el rango de $3.516e+5$ y $3.907e+5$ Pa. Perteneciente a la zona de color rojo en la escala de colores.

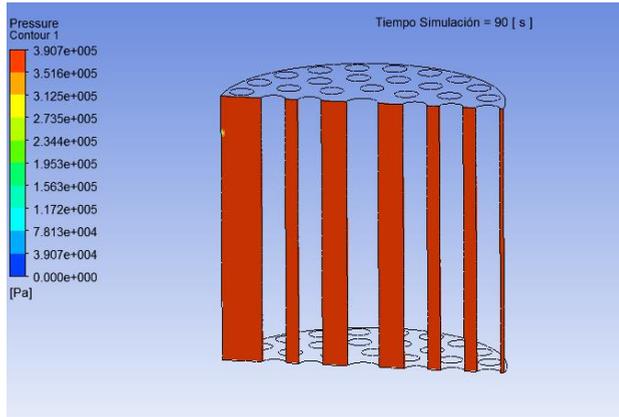


Figura 2. 36. *Presión de Vapor en 90 segundos*

El tiempo programado para la simulación es de 120 seg. y en la figura 2.37, se observa que la presión máxima que alcanza el vapor en la cámara de cambio de fase es de $3.907e+5$ Pa. También se puede visualizar que toda la cámara se encuentra de color rojo, esto significa que la cámara se encuentra presurizada.

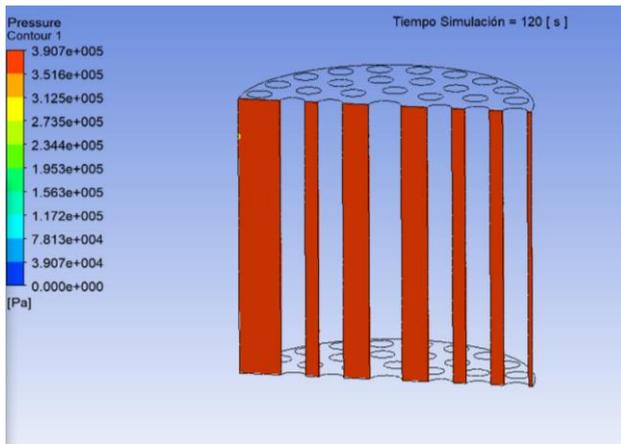


Figura 2. 37. *Presión de Vapor en 120 segundos*

CAPITULO 3

VALIDACION DE LA SIMULACIÓN DEL CALDERO

3.1 Introducción

La simulación realizada del caldero piro-tubular vertical, por medio del software de ANSYS Workbench, y los datos obtenidos en el experimento, permiten hacer una evaluación del método utilizado, y con el ciclo establecido.

Por medio de la validación se podrá demostrar que el método utilizado en la simulación, es el adecuado para el ciclo propuesto en el experimento.

3.2 Ciclo a Validar

En la puesta en marcha del caldero, existen varios ciclos de funcionamiento; para la simulación se va a considerar el ciclo que se resalta en la figura 3.1. el cual, al estar en funcionamiento, se encuentra con condiciones iniciales como son: presión, temperatura, niveles de agua y combustible.

Los ciclos de funcionamiento del caldero que se observan en la figura 3.1, son el resultado de haber realizado en el experimento.

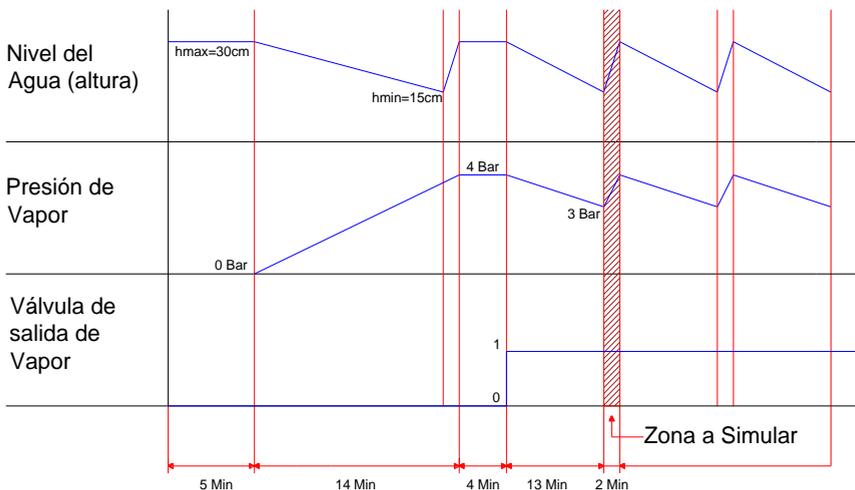


Figura 3. 1. Curvas de funcionamiento del Caldero en el experimento

En la figura 3.1 se resalta el ciclo a simular y la variable a ser validada es la presión. En este ciclo la presión inicia en 3 Bar y al transcurrir el tiempo de 120 seg. llega hasta los 4 Bar.

Los valores de presión obtenidos en el experimento, se muestran a continuación:

Tabla 1. 1. *Datos obtenidos del Experimento*

Minutos	Presión (Bar)
5	0
8	0,4
10	1,5
15	2,8
19	4
23	4
28	3,7
33	3,4
38	3,1
41	2,9
43	4
48	3,7
53	3,5
58	3,2
63	3
64	3,1
67	4
73	3,6
78	3,4
83	3,1
86	2,9
88	4

En la figura 3.2, se puede observar la curva de comportamiento de la presión en el experimento; el tiempo es de 88 minutos, mientras que el ciclo a simular es de 2 minutos como se aprecia en la figura 3.1.

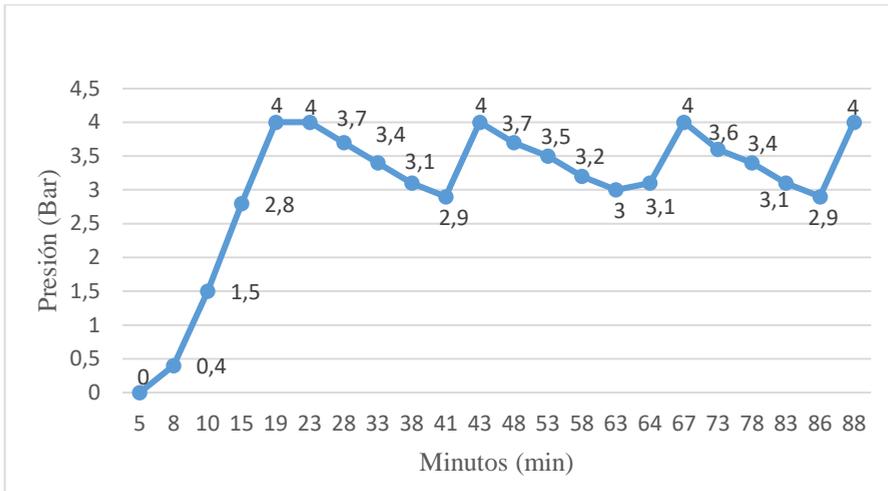


Figura 3. 2. *Ciclo de la presión a validar*

Con los datos obtenidos de la simulación, durante el tiempo de 120 segundos, la variable de presión, ha llegado al valor de $3.907e-5$ Pa, como se muestra en la figura 2.37. En la escala de colores, el ciclo inicia desde el color amarillo, hasta el color rojo, demostrándose que en el transcurso de tiempo establecido ha tenido un incremento hasta llegar al punto máximo.

3.3 Validación de la Presión

En el experimento se estableció el ciclo que inicia con una presión de 3 Bar y durante el tiempo de 120 segundos la presión aumento a 4 Bar. Estos valores fueron los referentes para la simulación en el software CFD obteniéndose el resultado de $3.907e-5$ Pa., en un tiempo de los 120 segundos, que al transformar las unidades se obtiene 3.907 Bar. Por lo tanto, la presión en el experimento (4 Bar) y la presión de la simulación (3.907), su diferencia es de (0.093), siendo muy similares.

Tabla 1. 2. *Datos obtenidos de la Simulación*

Segundos (s)	Presión (Pa)	Presión (Bar)
0	300000	3
5	300851	3,00851
10	306544	3,06544
15	312072	3,12072
20	317749	3,17749
25	323557	3,23557
30	329213	3,29213

35	334286	3,34286
40	337811	3,37811
45	341146	3,41146
50	345537	3,45537
55	349748	3,49748
60	353203	3,53203
65	356675	3,56675
70	359988	3,59988
75	363060	3,6306
80	365916	3,65916
85	368590	3,6859
90	371203	3,71203
95	374029	3,74029
100	377022	3,77022
105	380177	3,80177
110	383506	3,83506
115	386998	3,86998
120	390626	3,90626

En la figura 3.3, por medio de las líneas se indica el comportamiento de la presión. La línea de color azul representa los datos de presión registrados en el experimento, mientras que la línea de color rojo representa la presión de la simulación. Durante los 120 segundos que se registró y se simuló la información, los resultados demuestran que la diferencia es mínima como se observa en la figura a continuación.

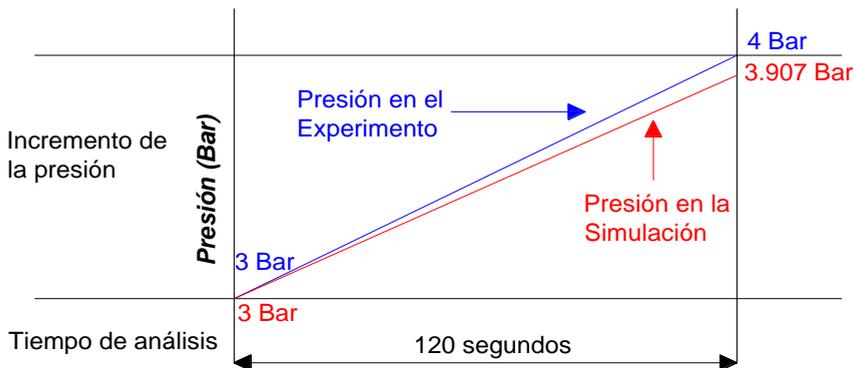


Figura 3. 3. Comparación de la Presión Experimento vs Simulación

CAPÍTULO 4

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones

Al realizar el análisis matemático y la simulación numérica del caldero pirotubular vertical, se determina el modelo matemático que describe su funcionamiento y el procedimiento de análisis. A través de este modelo se podrá aplicar a otros tipos de calderos.

Con el planteamiento del modelo matemático, se pudo conseguir el comportamiento de las variables del caldero, en este caso, se obtuvo el valor de la presión, con la cual se pudo comprobar que el modelo adoptado es el correcto.

Mediante la definición del dominio de análisis y condiciones de contorno, se estableció el ciclo a simular del caldero. De la misma forma, cuando se requiera obtener una variable en un ciclo determinado, se define el dominio y las condiciones de contorno.

Para resolver el modelo mediante el software CFD, se tuvo que implementar las condiciones de frontera, las cuales, al ser procesadas en la simulación, se obtuvieron los resultados deseados. La incorporación del software CFD, para la modelación de sistemas, es una herramienta muy importante, debido a que las ecuaciones resueltas, son muy complejas.

Al analizar y validar los resultados se puede observar que los valores obtenidos tanto de la experimentación como de la simulación presentan una diferencia mínima, siendo estos aceptables en la demostración del modelo aplicado. El análisis y la validación, son procesos que deben ser implementados en todo sistema, para comprobar que el método utilizado, es el apropiado.

4.2 Recomendaciones

Para la elaboración de cualquier proyecto se deben tener ciertas consideraciones como el registro de información, tiempos, equipos de medición, respaldo, etc., y estos datos a su vez, deben ser muy precisos para su posterior análisis.

El software de ANSYS es una herramienta muy completa, esto significa que para un mejor rendimiento se debe aprender a utilizar las diferentes opciones que presenta y con ello se pueden obtener mejores resultados.

Los métodos y procesos de resolución de ecuaciones que se realizan en las discretizaciones de la geometría a simular, a través del software CFD, involucra muchos recursos computacionales como son memoria RAM (Random Access Memory), procesamiento de la información (Procesador), unidad de procesamiento gráfico GPU (Graphics Processing Unit), y estos deben ser lo suficientemente capaces para soportar este tipo de análisis, por lo que se recomienda la utilización de un computador con las siguientes características: Una memoria RAM de unos 16 Gb, un procesador Core i7 de 8 núcleos, una unidad de procesamiento gráfico de una tarjeta NVIDIA geforce gtx 1060, además se obtiene mejor rendimiento si se trabaja con un disco sólido.

Para un mejor rendimiento del caldero, la colocación de los tubos debería ser de una forma simétrica ya que la distribución de calor sería más uniforme y adecuada.

4.3 Bibliografía

- Bengt, A., Ronnie, A., Love, H., Mikael, M., Rahman, S., & Berend, v. W. (2012). *Computational Fluid Dynamics*. New York: The United Kingdom at the University Press, Cambridge.
- Çengel, Y., & Cimbala, J. (2006). *FLUID MECHANICS. FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS*. New York, NY 10020: The McGraw-Hill Companies, Inc.
- Durán, L. (2017, Julio 1). <http://oa.upm.es>. Retrieved from http://oa.upm.es/47337/1/TFG_Luis_Felipe_Duran_Vinuesa.pdf
- Kessler, M. (2016, Junio 24). www.esss.co. Retrieved from <https://www.esss.co/blog/es/2016/06/dinamica-de-fluidos-computacional-que-es/>
- Mitopencourseware. (2003, s.f. s.f.). <http://mit.ocw.universia.net/>. Retrieved from <http://mit.ocw.universia.net/1.061/f01/pdf/CONSERVE.pdf>
- NumeroDe. (2012, sf sf). <http://numerode.com>. Retrieved from <http://numerode.com/para/nmero-de-schmidt.php>
- Universidad de Valladolid. (s.f, s.f s.f). www.eis.uva.es. Retrieved from <http://www.eis.uva.es/~qgintro/esteq/tutorial-02.html>
- Worldmeteo. (2018, Enero 20). www.worldmeteo.info/es. Retrieved from <https://www.worldmeteo.info/es/america-del-sur/ecuador/cuenca/tiempo-101293/>

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA SALESIANA

UNIDAD DE POSGRADOS

MAESTRÍA EN MÉTODOS MATEMÁTICOS Y SIMULACIÓN NUMÉRICA EN INGENIERÍA

Autor:
Jhoffre Maldonado Durazno

Dirigido por:
Olena Leonidivna Naidiuk, MC.

ANÁLISIS MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL COMPORTAMIENTO DE FLUIDOS EN UN CALDERO PIROTUBULAR VERTICAL

En el desarrollo de nuevas técnicas para perfeccionar la producción en la industria, se han realizado avances muy significativos en la ingeniería como es la simulación de sistemas, la cual, ha desempeñado un papel muy importante para la obtención de resultados sin la necesidad de realizar un prototipo. En este trabajo se plantea la simulación de un de un caldero pirotubular vertical, que, para su desarrollo, se va a realizar el primer análisis de la cámara de combustión y el segundo análisis de la cámara de cambio de fase. En la simulación, se establece un ciclo y la variable a analizar es la presión del vapor, de manera que los valores obtenidos son validados con los datos conseguidos experimentalmente.

Para la simulación, se hace uso de un software CFD (*Computational Fluid Dynamics*), con el cual se establece un modelo que servirá para ejecutar el proceso de cálculo de las ecuaciones y variables del sistema.