

DETERMINACIÓN DE LOS LÍMITES DE LA VELOCIDAD DE PROPAGACIÓN EN LOS FRENTE Y PULSOS DE COMBUSTIÓN

Toni Pujol, Joaquim Fort*, Josep R González, Joaquim Velayos

**Àrea de Mecànica de Fluids, Dept. d'EMCI, Escola Politècnica Superior, Edifici P-II,
Campus Montilivi, Girona 17071**

***Dept. de Física, Escola Politècnica Superior, Edifici P-II, Campus Montilivi, Girona
17071**

Teléfono: +34 972 41 84 89, Fax: +34 972 41 80 98

e-mail: toni.pujol@udg.edu

RESUMEN

En la aproximación al estudio de la combustión, diversos autores optan por la utilización de complejos modelos numéricos que incorporan una gran variedad de procesos químicos y dinámicos con la intención de representar con sumo detalle el sistema real (véase, e.g., Baukal et al., 2001). Una vía complementaria al estudio de la combustión consiste en la utilización de modelos simples que permitan obtener conclusiones relevantes sobre el comportamiento global del proceso (véase, e.g., Fort et al., 2000, 2004).

En los modelos más simples de combustión para llamas premezcladas, la dinámica para la situación no-advectiva se determina mediante las ecuaciones de evolución para la temperatura (o, equivalentemente, energía) y para la densidad del combustible. Si se ignoran las pérdidas de calor por radiación, la propagación de la llama consiste en un frente que se desplaza a una cierta velocidad. Por otra parte, la inclusión de los términos de pérdidas radiativas conlleva a la propagación de pulsos y no de frentes. La determinación de los límites, tanto superiores como inferiores, de la velocidad de propagación de estos frentes y pulsos es de especial interés en los procesos industriales.

Aquí utilizamos simples modelos de reacción-difusión sin advección en los cuales adoptamos diferentes métodos para determinar el límite superior e inferior para la velocidad de propagación del frente. Los resultados para los valores límite aquí obtenidos son contrastados con simulaciones numéricas de la evolución del proceso de combustión.

1. INTRODUCCIÓN

Recientemente, la modelización de los procesos de combustión mediante simulaciones numéricas ha recibido un gran interés, en parte debido a la dificultad en la obtención de datos experimentales (véase, e.g., Warnatz et al., 2001). Algunos de los modelos de combustión actualmente disponibles pueden incorporar una gran variedad de procesos, incluyendo numerosas reacciones químicas acopladas a las ecuaciones de transferencia de masa, cantidad de movimiento y energía. Es aquí donde se precisa una elevada potencia de cálculo para obtener simulaciones lo más próximas posibles al proceso real. Otros autores, sin embargo, han decidido estudiar los procesos de combustión mediante una vía más analítica con la utilización de simples modelos a partir de los cuales se obtiene una visión más general del problema.

Aquí, empleamos un simple modelo de combustión basado en las ecuaciones de reacción-difusión (RD), cuya formulación se ha demostrado muy útil para proporcionar información sobre la evolución de frentes de poblaciones ecológicas, epidemias, etc. En nuestro caso, este simple modelo de combustión será utilizado para determinar la velocidad de propagación de la llama. Además, aplicando las herramientas matemáticas necesarias, se obtendrán unos valores límite (superiores e inferiores) para esta velocidad de propagación cuya validez será contrastada mediante comparación con las simulaciones numéricas de las ecuaciones.

2. VELOCIDAD DE LA LLAMA EN FRENTES

El modelo aquí utilizado corresponde a un sistema formado por dos componentes (combustible gaseoso y no combustible) de una llama premezclada, sin difusión de masa y a presión constante. Bajo estas suposiciones, la ecuación de evolución de la energía, según Warnatz et al. (2001) y Fort et al. (2004) es,

$$\rho_0 c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + QA\rho \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right), \quad (1)$$

donde T es la temperatura de la llama esférica, c el calor específico, ρ_0 la densidad total (constante), λ la conductividad térmica (constante), Q la tasa de calor producida por la reacción de combustión por unidad de masa, A el factor preexponencial de la aproximación de Arrhenius con E_a la energía de activación, R la constante universal de los gases y T_0 la temperatura ambiente. En la ecuación (1), ρ es la densidad del combustible cuya ecuación de evolución es,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -A\rho \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right). \quad (2)$$

El primer término del miembro de la derecha de la ec. (1) corresponde al término de conducción, mientras que el último es el de reacción. De esta forma, la ec.(1) puede ser interpretada como una ecuación típica de RD.

Por conveniencia del análisis analítico, expresamos las ecuaciones (1) y (2) en términos de las siguientes variables y parámetros adimensionales,

$$\theta \equiv T \frac{R}{E_a}, \quad t' \equiv t \frac{RQA}{cE_a}, \quad r' \equiv r \sqrt{\frac{RQA\rho_0}{\lambda E_a}}, \quad \rho' \equiv \frac{\rho}{\rho_0}, \quad C \equiv \frac{cE_a}{RQ}, \quad (3)$$

de donde se obtiene,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t'} = -C\rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right). \quad (5)$$

Si, para un cierto valor de C y de θ_0 , representamos la distribución espacial de θ y ρ' para diferentes valores temporales t' , obtenemos los resultados mostrados en la figura 1. De la figura 1 se deduce que el campo de temperaturas (línea continua) se propaga como un frente a una cierta velocidad. Ésta es la misma en la que se consume el frente de

combustible (línea a puntos) tal y como también se observa en la misma figura. Es importante destacar que, una vez ocurrida la reacción exotérmica de combustión, la temperatura en éste modelo no disminuye con el tiempo debido a que no se incluyen las pérdidas por radiación en la ecuación (1). Por supuesto, esta suposición es totalmente irreal pero nos sirve como primera aproximación para aplicar las técnicas matemáticas idóneas para determinar los límites de velocidad del frente de combustión. Una situación más real, incluyendo las pérdidas de calor por radiación, se estudiará en la sección 3.

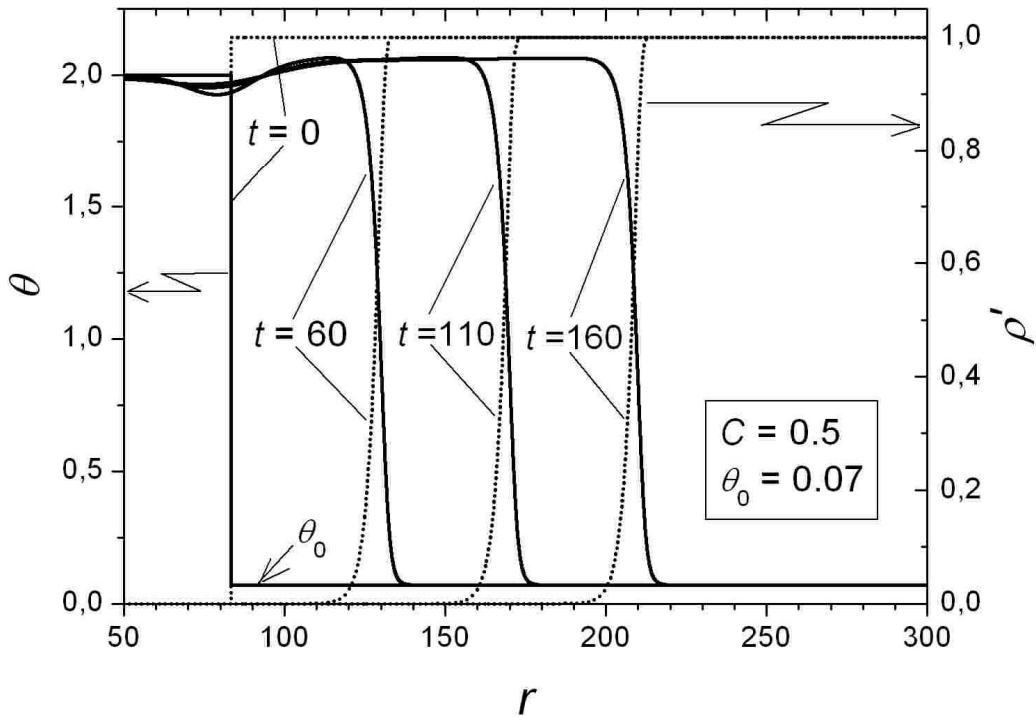


Figura 1. Ejemplos de evolución del frente de temperatura (adimensional; línea continua) y del frente de consumo de combustible (adimensional; línea a puntos).

Aplicando la ecuación de conservación de la energía, según Zeldovich (véase la discusión en Fort et al. (2004)), obtenemos,

$$\theta - \theta_0 = \frac{1 - \rho'}{C}, \quad (6)$$

donde ya hemos utilizado la variables adimensionales introducidas en (3).

A partir de la ecuación (6), y empleando la nueva variable adimensional θ' definida como,

$$\theta' \equiv \frac{\theta - \theta_0}{\theta_{\max} - \theta_0}, \quad (7)$$

donde θ_{\max} corresponde al valor de la temperatura máxima obtenida en el frente de combustión, la ecuación (4) se puede expresar como,

$$\frac{\partial \theta'}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2} + f(\theta'), \quad (8)$$

donde,

$$f(\theta') = C(1 - \theta') \left(e^{\frac{1}{\theta_0 + (\theta_{\max} - \theta_0)\theta'}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right). \quad (9)$$

De esta forma, hemos sido capaces de expresar la evolución de la temperatura en términos de una única ecuación RD donde el término de reacción se define en (9). Para el estudio que sigue, es esencial que la variable θ' varíe entre $0 \leq \theta' \leq 1$, con $f(0) = f(1) = 0$ y $f(\theta') > 0$ para $0 < \theta' < 1$. De esta forma, se pueden aplicar varios métodos para analizar los límites superior e inferior de la velocidad de propagación de la llama de combustión en función del término de reacción (9). La tabla 1 resume los cuatro métodos aquí analizados con las ecuaciones empleadas para la determinación del límite inferior y/o superior (véase Fort et al., 2004).

Los métodos de Kolmogorov-Petrovski-Piskunov y Zeldovich-Frank-Kamenetski solo proporcionan una cota inferior. Por el contrario, el método de Aronson-Weinberger proporciona una cota superior. Finalmente, el método de Benguria-Depassier nos proporciona una cota superior e inferior.

Tabla 1. Ecuaciones empleadas para determinar los límites inferiores y superiores de la velocidad de propagación del frente de combustión en función del término de reacción (9).

Método ¹	Límite inferior	Límite superior
KPP	$2\sqrt{\left(\frac{df(\theta')}{d\theta'}\right)_{\theta'=0}}$	-
ZFK	$\sqrt{2\int_0^1 f(\theta')d\theta'}$	-
BD	$\frac{4\sqrt{n} \left(\int_0^1 f(\theta')d\theta'\right)^{n+1/2}}{2n+1 \left(\int_0^1 \theta' f(\theta')d\theta'\right)^n}$ para $0,5 \leq n \leq 1$	$2\sqrt{\sup\left(\frac{df}{d\theta'}\right)}$
AW	-	$2\sqrt{\sup\left(\frac{f(\theta')}{\theta'}\right)}$

KPP: Kolmogorov-Petrovski-Piskunov

ZFK: Zeldovich-Frank-Kamenetski

BD: Benguria-Depassier

AW: Aronson-Weinberger

La figura 2 compara los resultados de la velocidad de propagación del frente a partir de la integración numérica de las ecuaciones (4) y (5) con los límites superior e inferior resumidos en la tabla 1. Los valores para el método KPP no se muestran en la figura 2 ya

que es varios órdenes de magnitud inferior al resultado de las simulaciones. Como se observa, los mejores métodos para estimar la velocidad de propagación del frente de combustión corresponden al de Aronson y Weinberger (límite superior) y Benguria y Depassier (límite inferior) para el caso de $n = 1$.

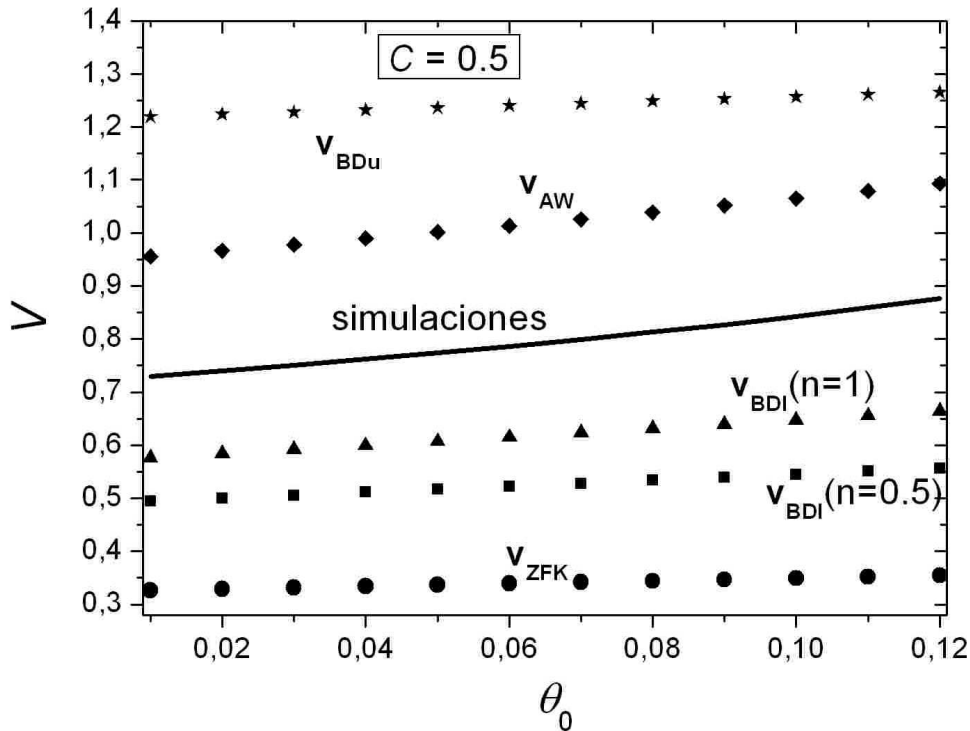


Figura 2. Estimaciones de los límites de la velocidad de propagación del frente de combustión para diferentes valores de θ_0 (temperatura ambiente adimensional) aplicando los diferentes métodos mostrados en la tabla 1 comparados con los valores obtenidos a partir de las simulaciones numéricas de las ecuaciones (4) y (5).

3. VELOCIDAD DE LA LLAMA EN PULSOS

En la sección anterior ya se comentó como la falta de pérdidas de calor mediante procesos radiativos conducía a la propagación de un frente. Sin embargo, cuando se introducen las pérdidas por radiación, la ecuación (1) incorpora un nuevo término, siendo,

$$\rho_0 c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + QA\rho \left(e^{\frac{E_a}{RT}} - e^{\frac{E_a}{RT_0}} \right) - 4a\sigma(T^4 - T_0^4), \quad (10)$$

donde a es el coeficiente de absorción y σ la constante de Stefan-Boltzmann. Este nuevo término también se puede introducir, de forma adimensional, en la ecuación (4) que, conjuntamente con (5) nos permiten obtener la evolución de la temperatura de la llama y de la densidad de combustible. De esta forma y, como en la figura 1, la figura 3 muestra la distribución espacial de la temperatura (adimensional: línea continua) y de la densidad de combustible (adimensional; línea a puntos) para diferentes valores del tiempo

(adimensional). En comparación con la figura 1, aquí se observa como la propagación corresponde a un pulso y no a un frente. La causa es la pérdida de energía por radiación en las regiones donde ya se ha producido la combustión, con el consecuente descenso de la temperatura.

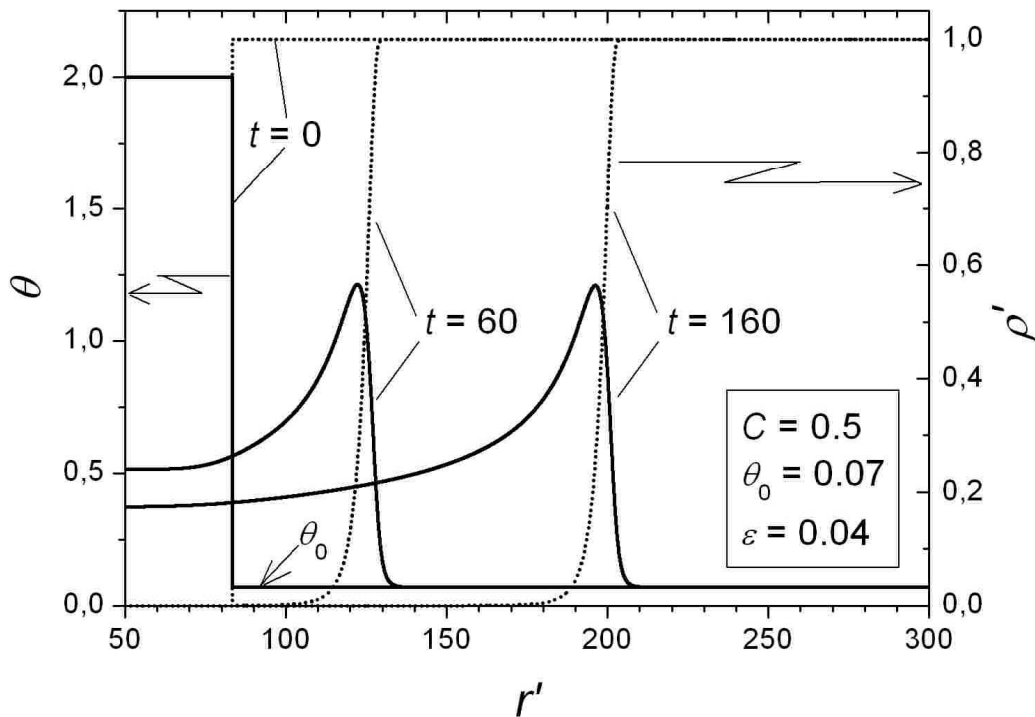


Figura 3. Ejemplos de evolución del frente de temperatura (adimensional; línea continua) y del frente de consumo de combustible (adimensional; línea a puntos) cuando incorporamos las pérdidas radiativas. El parámetro adimensional $\varepsilon = 4a\sigma R/(QA\rho_0E_a)$ corresponde a una emisividad adimensional. En comparación con la figura 1, aquí se propagan pulsos y no frentes.

Este comportamiento, sin embargo, imposibilita la aplicación de la mayoría de los métodos aplicados en la sección 2 para la estimación de los límites de velocidad (superior e inferior) de la propagación de la llama (véase Fort et al., 2004). El único método válido en este caso corresponde al de Aronson y Weinberger, cuya comparación con los resultados obtenidos a partir de la simulación se muestran en la figura 4.

4. CONCLUSIONES

Hemos analizado un modelo simple de combustión de llama premezclada formado por dos únicos componentes (combustible y no-combustible). El análisis de las ecuaciones nos ha permitido expresar la ecuación de evolución de la temperatura en términos de una única ecuación de reacción-difusión para una sola variable.

Sin tener en cuenta las pérdidas de calor debido a los procesos radiativos, el sistema genera un frente de temperatura que se propaga a una cierta velocidad. Hemos comparado las estimaciones para la velocidad de propagación del frente obtenidas mediante la utilización de varias expresiones tanto para el límite superior como para el inferior. Para el límite superior, el método de Aronson-Weinberger es óptimo, mientras que para el límite inferior, el método de Benguria-Depassier ofrece los mejores resultados.

Teniendo en consideración las pérdidas de calor por radiación, se obtiene la propagación de un pulso y no de un frente. Ello es debido a la disminución de temperatura por pérdidas radiativas que experimenta el producto de la reacción cuando ésta se aleja. En el pulso de combustión, el único método útil para estimar su velocidad de propagación corresponde al de Aronson-Weinberger que ofrece una aproximación adecuada para el límite superior.

Nótese que los límites aquí obtenidos son hallados a partir de las expresiones matemáticas que contienen, únicamente, el término de reacción. Por ello, estos límites para la velocidad se obtienen sin necesidad de aplicar ninguna integración numérica de las ecuaciones, siendo especialmente interesantes para una evaluación aproximada del comportamiento del sistema.

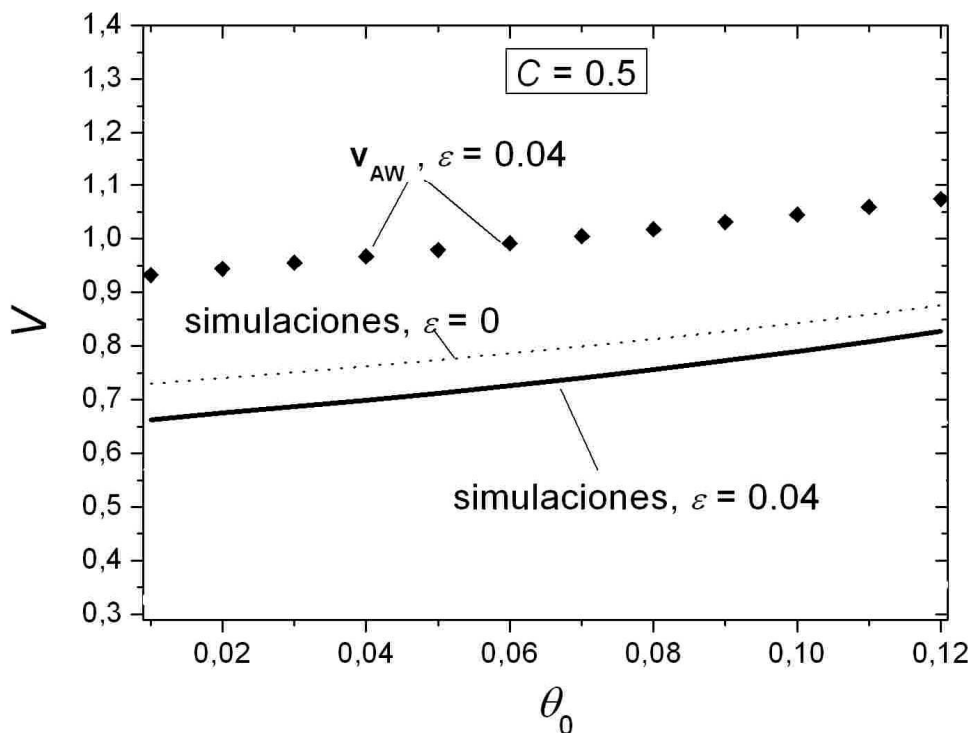


Figura 4. Estimaciones de los límites de la velocidad de propagación del frente de combustión para diferentes valores de θ_0 (temperatura ambiente adimensional) aplicando el método de Aronson-Weinberger en el caso de incluir el término de pérdidas de calor por radiación. En comparación, se muestra el valor obtenido a partir de las simulaciones numéricas (caso $\varepsilon = 0.04$) y el obtenido sin pérdidas radiativas ($\varepsilon = 0$; figura 2).

REFERENCIAS

Baukal, C. E. Jr., V. Y. Gershtein, X. Li (2001). *Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion*. 630 páginas, CRC Press, Boca Ratón, Florida.

Fort, J., T. Pujol, A. S. Cukrowski (2000), Several-temperature systems: extended thermodynamics and thermal wavefronts *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 6953-6973

Fort, J., D. Campos, J. R. González, J. Velayos (2004), Bounds for the propagation speed of combustion flames. *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 7185-7198.

Warnatz, U., U. Maas, R. W. Dibble (2001). *Combustion*. 299 páginas, Springer, Berlin.