Estudio Numérico del Efecto de la Presión en el Proceso de Mezcla Metano-Oxígeno en un Arreglo de Chorros 4-Lug Bolt

Mauricio De la Cruz⁽¹⁾, Georgiy Polupan⁽¹⁾, Eliseo Martínez⁽²⁾ y Ignacio Carvajal⁽¹⁾

(1) Instituto Politécnico Nacional, Laboratorio de Ingeniería Térmica e Hidráulica Aplicada, Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Unidad Profesional Zacatenco. Av. IPN s/n, Edif. 5, 3er piso, C.P. 07738 México D.F., - México (e-mail: mauriciodlca@hotmail.com, gpolupan@ipn.mx)

(2) Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México Ciudad Universitaria, 04510 México D.F., México.

Recibido Jul. 20, 2014; Aceptado Sep. 26, 2014; Versión final recibida Nov. 19, 2014

Resumen

Se presentan los resultados numéricos del proceso de mezclado metano-oxígeno para un sistema confinado con arreglo de chorros 4-Lug-Bolt bajo la influencia de la variación de presión. El análisis fue dividido en dos etapas, baja y alta presión, delimitado bajo el criterio de los límites de flamabilidad. A bajas presiones la densidad se modeló con la ecuación de gas ideal, mientras que a altas presiones con la ecuación de Redlich-Kwong. Las predicciones mostraron que el mezclado está fuertemente influenciado por la recirculación entre los chorros de metano y oxígeno, así como por efecto de arrastre del oxígeno sobre el metano. Por otra parte, la presión no presenta influencia sobre el límite de flamabilidad inferior, mientras que si afecta al límite de flamabilidad superior. A pesar de estos efectos en los límites de flamabilidad, la presión no muestra un efecto significativo en el proceso de mezcla por difusión metano-oxígeno.

Palabras clave: mezcla de gases, simulación numérica, RANS, límites de flamabilidad

Numerical Study of the Pressure Effect on the Methane-Oxygen Mixing Process in a 4- Lug Bolt Jet Arrangement

Abstract

Numerical results of methane-oxygen mixing process in a contained 4-Lug-Bolt jets array system under the influence of pressure variation are presented. The analysis was divided in two stages, low and high pressure, under the flammability limits criteria. At low pressures the density was modeled with the ideal-gas equation and for high pressures with the Redlich-Kwong equation. The predictions show that the gas mixture is highly influenced by recirculation between oxygen and methane jets, as well as a dragging effect of oxygen over the methane jet. Moreover, the pressure has no influence on the lower flammability limit, whereas it does affect the upper flammability limit. Despite these effects on flammability limits, the pressure shows no significant effect on the mixing of methane-oxygen by diffusion.

Keywords: gas mixture, numerical simulation, RANS, flammability limits

INTRODUCCIÓN

En fenómenos de combustión turbulenta, el proceso de mezcla de fluidos es de gran importancia ya que una reacción exotérmica eficiente requiere de un mezclado de especies en proporciones que permitan la mayor liberación de energía (poder calorífico) durante el proceso de oxidación (Benedict, M. et al, 1940). Existen dos tipos de procesos de mezclado: pre-mezcla y por difusión. Mientras que en la de tipo pre-mezclado el combustible y el comburente pueden mezclarse antes de la zona de combustión, en la de difusión, la mezcla se realiza en la zona de combustión. Durante una combustión por pre-mezcla, se alcanzan los límites de flamabilidad al momento de inyectarse a la zona de reacción. La combustión es más eficiente por su carácter homogéneo anticipado de mezcla y la flama no alcanza grandes longitudes (Bartok y Sarofim, 1990), lo que permite reducir el tamaño de la cámara de combustión. Sin embargo, presenta problemas de retro llama durante el control del proceso de la combustión (Gaydon y Wolfhard, 1979). Por su parte, en una combustión por difusión el combustible y el comburente son inyectados de manera independiente y la reacción exotérmica inicia cuando se alcanzan los límites de flamabilidad en la zona de reacción. Siendo esta una combustión menos eficiente ya que alcanza una temperatura de llama menor en comparación con la premezclada (Bartok y Sarofim, 1990).

Las ventajas de una combustión por difusión, como son la longitud de la llama y la imposibilidad de que se presente el fenómeno de retro llama, son adecuadas para sistemas donde el control de la combustión es imperativo. Un fenómeno de combustión a alta presión requiere un control más riguroso de la flama con la finalidad de evitar problemas operativos. En la literatura abierta existen diversos trabajos enfocados a fenómenos de combustión o para casos de dos flujos gaseosos. La mayoría de los estudios analizan procesos premezclados. También, en algunos trabajos sobre combustión, se aborda la eficiencia energética junto con los efectos de combustión con aire enriquecido con oxígeno (Cacua y Herrera 2013). Existen algunos trabajos enfocados a procesos de mezcla por difusión que sólo consideran la inyección del combustible y el comburente en forma anular. Además de estos estudios, en menor proporción existen análisis de las características de combustión enriquecida con oxígeno para la utilización a nivel industrial aplicada (J.C. Gonzales et al, 2009). Por consiguiente, el presente trabajo, plantea el estudio del proceso de mezclado por difusión y se analizan los mecanismos físicos del proceso de mezcla metano-oxígeno en la zona de combustión.

Los trabajos desarrollados por Fossi (1995), Cioncollini, et al. (2009) analizan la mezcla de flujos en dos fases. Los trabajos desarrollados por Grech, et al. (2012), Cutrone, et al. (2006), Smith, et al. (2007) analizan numéricamente la combustión por difusión en cohetes de propulsión a chorro y en turbinas de gas. Estos trabajos muestran solo el proceso de combustión a condiciones de referencia. Durante el proceso de mezclado a dos fases a presiones transcritas se exhibe que la interfase entre ellas prácticamente desaparece como lo muestra el trabajo de G. Singla et al (2004). Estos trabajos utilizan la técnica de las ecuaciones promediadas RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) para realizar las simulaciones numéricas. La alternativa RANS es de menor exigencia computacional, en comparación con otras técnicas numéricas como la simulación directa (DNS) y la simulación de las grandes escalas (LES), y por ello, es ampliamente utilizada en casos prácticos de interés industrial. Existe información para diversos combustibles inmersos en aire como el modelo semi-empírico propuesto por Jones (1965). Los datos proporcionados por Lewis y von Elbe (1987) indican que los límites de flamabilidad inferior y superior a una presión de una atmósfera para metano inmerso en oxígeno son 5.1% y 61%, respectivamente. Por consiguiente, los valores de los límites de flamabilidad son obtenidos a partir de la información proporcionada por Jones (1965) y por Lewis y von Elbe (1987). Por lo tanto, el presente trabajo analiza numéricamente con la alternativa RANS la dispersión y el mezclado de un chorro de oxígeno y cuatro periféricos de metano en un arreglo 4-Lug Bolt bajo dos esquemas de presión.

El propósito del trabajo es analizar la influencia de la presión en la dispersión de chorros y en el proceso de mezcla metano-oxígeno. El análisis está planteado para una configuración con una boquilla central de 16.6mm de diámetro y cuatro periféricas de 5.9mm de diámetro. Las simulaciones numéricas consideran el análisis de flujos turbulentos incompresibles en frío (sin combustión) con la finalidad de analizar los parámetros que afectan la longitud de mezcla bajo el criterio de los límites de flamabilidad.

DESARROLLO MATEMÁTICO

Para que la mezcla de las dos especies pueda hacer reacción mediante las concentraciones estequiométricas (Williams, F. A. 1985), es necesario alcanzar concentración de los límites de flamabilidad, tanto inferior como superior. Sin embargo en algunos casos de estudio con combustibles cuyo punto de auto ignición es muy bajo (350 K) es posible estimar los límites de inflamabilidad sin datos experimentales. Jones (1965) encontró que para muchos vapores de hidrocarburos el LFL y el UFL son una función de la concentración estequiometría (C_{st}) del combustible:

$$LFL = 0.55C_{st} \quad (1)$$

$$UFL = 3.50C_{st} \quad (2)$$

La presión tiene poco efecto sobre el LFL excepto a presiones muy bajas (menos de 5300 pascales de presión absoluta). El UFL aumenta significativamente a medida que se incrementa la presión, ampliando el intervalo de inflamabilidad. Una expresión empírica para el UFL (Zlochower y Green 2009) como una función de la presión es:

$$LFL_p = LFL + 0.1(\log_{10}P + 1) \quad (3)$$

$$UFL_p = UFL + 20.6(\log_{10}P + 1) \quad (4)$$

El LFL se calcula a través de:

$$LFL = \frac{0.55(100)}{4.76m + 1.19x - 2.38y + 1} \quad (5)$$

Y el UFL a través de:

$$UFL = \frac{3.50(100)}{4.76m + 1.19x - 2.38y + 1} \quad (6)$$

Cuando el límite de flamabilidad superior alcanza los 80×10^5 Pa, la concentración de oxígeno comienza a disminuir teniendo únicamente trazas hasta que la concentración de oxígeno es nula, lo cual, no corresponde con la realidad (Williams, F. A. 1985). Es por ello que es necesario hacer una corrección después del punto crítico para ambos gases.

Fig.1. Límite de flamabilidad superior calculado y corregido.

Esto significa que, una concentración de 5% de O_2 con CH_4 pudiera ser explosiva. La concentración de los componentes debe ser recalculada y por ser función de la presión también se reajusta el cálculo no solo para las especies sino también para la mezcla. Con la concentración en función de la presión se calculan los límites de flamabilidad y con ellos la densidad de mezcla. Esta mezcla solo requerirá la energía de ignición para comenzar una reacción (combustión no contemplada en el estudio). En la tabla 1 se muestran las densidades calculadas para los límites de flamabilidad en función de la presión y que concuerdan con los datos reportados por Hristova, M. y Tchaoushev, S. (2006).

El modelo de Zabetakis (1965) es utilizado como referencia para evaluar los límites de flamabilidad de metano-oxígeno a presiones de 1×10^5 , 50×10^5 , 100×10^5 y 200×10^5 Pa. Este modelo propone la siguiente correlación para evaluar los límites de flamabilidad (FL):

$$FL = FL_0 + k_{fl} \log P \quad (10)$$

En el caso del límite de flamabilidad inferior (LFL) FL_0 es de 4.9% y k_{fl} es de -0.71. Para el límite de flamabilidad superior (UFL) FL_0 es de 14.1% y k_{fl} es de 20.4. La información experimental anterior no debe aplicarse directamente a mezclas metano-oxígeno puro porque la correlación está enfocada a mezclas metano-aire. Por ello, la correlación de Zabetakis es utilizada como base para el cálculo de los límites de flamabilidad. El límite de flamabilidad inferior se calcula directamente con la ecuación (1) porque su valor de referencia (condiciones atmosféricas) es el mismo y no necesita de ajuste alguno. Sin embargo, el límite de flamabilidad superior requiere de un análisis de los cálculos obtenidos a partir de la ecuación (10) porque los valores de referencia son muy distantes. Los resultados muestran que el límite de flamabilidad es mayor a 100% para presiones mayores a 80×10^5 Pa como se muestra en la figura 1.

Esta gráfica presenta un incremento de 34.6 % para una presión de 5×10^6 Pa y un posterior incremento de 12.2 % para una presión de 2×10^7 Pa. Los resultados indican que el mayor impacto en el UFL es a 5×10^6 Pa. Esta observación coincide con el gráfico presentado por Zabetakis (1965) que muestra un comportamiento asintótico a partir de la presión de mayor influencia en el UFL. Por consiguiente, el trabajo plantea que el UFL para una mezcla metano-oxígeno tiene un comportamiento asintótico a presiones mayores a 5×10^6 Pa y los límites de flamabilidad son obtenidos a partir de esta consideración, cuyos resultados son mostrados en la tabla 1.

Tabla 1. Densidad de mezcla (metano-oxígeno) para los límites de flamabilidad.

Para el límite Inferior (LFL)				Para el límite Superior (ULF)		
Presión 1×10^5 (Pa)	Porcentaje de CH_4 de mezcla	Porcentaje de O_2 de mezcla	Densidad de mezcla LFL (kg/m^3)	Porcentaje de CH_4 de mezcla	Porcentaje de O_2 de mezcla	Densidad de mezcla UFL (kg/m^3)
1	5.23	94.77	1.236	60.88	39.12	0.810
5	5.30	94.70	6.175	75.28	24.72	3.717
10	5.33	94.67	12.346	81.48	18.52	7.181
50	5.40	94.60	61.689	95.88	4.12	33.272
100	5.41	94.58	115.366	95.88	4.12	66.545
200	5.42	94.58	226.962	95.88	4.12	125.842

En física y termodinámica, la ecuación de estado de Redlich-Kwong es una ecuación empírica, algebraica que relaciona la temperatura, la presión y el volumen de los gases. Por lo general, es más precisa que la ecuación de van der Waals y la ecuación de gas ideal a temperaturas por encima de la temperatura crítica (Redlich y Kwong, 1949). La ecuación de Redlich-Kwong ha sido objeto de muchas revisiones y modificaciones, con el fin, tanto de mejorar la exactitud de la predicción de propiedades de la fase gaseosa de varios compuestos, como en mejorar las condiciones que se simulan a temperaturas bajas, incluidos los equilibrios líquido-vapor. Esta ecuación resulta más precisa para calcular las propiedades de la fase gaseosa cuando el cociente entre la presión y la presión crítica es menor que la mitad del cociente entre la temperatura y la temperatura crítica. La ecuación Redlich-Kwong (Murdock, J. W. 1993) es formulada como:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{\sqrt{T}V_m(V_m + b)} \quad \text{dónde:} \quad a = \frac{0.4275R^2T_c^{5/2}}{P_c} \quad b = \frac{0.08664RT_c}{P_c} \quad (11)$$

Las constantes a y b son diferentes dependiendo del gas de estudio. Las constantes pueden calcularse a partir de los datos del punto crítico del gas (James, M. 1993). Además también es adecuada para los cálculos cuando guardan una relación entre la presión y la presión crítica (presión reducida) junto con la relación entre la temperatura y la temperatura crítica (temperatura reducida) o mezcla de dos o más especies gaseosas. Para nuestro caso de estudio resulta:

$$\frac{P}{P_c} < \frac{T}{T_c} \rightarrow \frac{1}{50} < \frac{300}{2 \cdot 190.56} \rightarrow 0.02 < 0.787 \quad (12)$$

MODELO NUMERICO

La simulación numérica planteada en este trabajo es para el proceso de mezcla de chorros de oxígeno y metano a 1×10^5 y 10×10^5 Pa (sub-crítica), 50×10^5 (crítica) 100×10^5 y 200×10^5 Pa (supercrítica). Las simulaciones numéricas realizan el cálculo de la densidad con la ecuación de estado de gas ideal para la primera etapa orientada desde 1×10^5 a 10×10^5 Pa, Para la segunda etapa de 50×10^5 , 100×10^5 y 200×10^5 Pa se resuelve bajo la ecuación de estado o modelo de Redlich-Kwong de gas real. El trabajo considera que

la inyección de los flujos y su proceso de mezcla se realizan para flujos turbulentos e incompresibles a una temperatura de 300K (27°C) sin reacción química (mezclado en frío). El análisis está planteado para una inyección de oxígeno en una boquilla central de 16.89mm de diámetro y una inyección de metano por medio de 4 boquillas periféricas de 5.86mm de diámetro. La distancia considerada entre ejes de los inyectores es de 33.87mm (distancia radial). El propósito de las simulaciones numéricas es analizar la influencia de las presiones dentro del reactor y como afectan el proceso de mezcla de los flujos a una fase e incompresibles (ambas especies en fase gaseosa), bajo el criterio de los límites de flamabilidad.

La discretización del dominio de cálculo para el sistema es mediante una malla no estructurada que contiene 890000 celdas. El trabajo hace énfasis en el transporte de especies sin pre-mezcla y sin reacción. Los componentes de la mezcla son metano y oxígeno modelados como gases ideales e incompresibles. Las simulaciones numéricas plantean una condición de frontera de Dirichlet con un perfil de velocidades uniforme de 10m/s para los chorros de entrada y considerando una intensidad de la turbulencia de 5%. La condición de frontera del dominio de cálculo del reactor es de no deslizamiento en las paredes. Para las simulaciones se utilizó el software comercial ANSYS Fluent para predecir el proceso de mezclado de metano-oxígeno. Como se mencionó anteriormente, el objetivo del trabajo es el análisis del comportamiento de los chorros en un sistema presurizado.

El análisis numérico del proceso de mezcla oxígeno-metano es por difusión. Esto implica que las ecuaciones a resolver son la de conservación de masa, la de cantidad de movimiento y una ecuación de especie química conservativa. La ecuación de conservación de la masa se define mediante la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\vec{V}}) = 0 \quad (13)$$

La ecuación de conservación de la cantidad de movimiento se expresa mediante la siguiente relación:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{\vec{V}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\vec{V}} \bar{\vec{V}}) = -\nabla \bar{p} + \mu \nabla^2 \bar{\vec{V}} - \nabla \cdot \bar{\vec{\tau}} + \rho \bar{\vec{f}}_m \quad (14)$$

La ecuación de especie conservativa se expresa de la siguiente forma:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} y_{xi})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\vec{V}} y_{xi}) - \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{ct}} \right) \nabla y_{xi} \right] = 0 \quad (15)$$

La consecuencia de promediar la ecuación de transporte de cantidad de movimiento es la aparición de un término que contiene el promedio de las fluctuaciones ($\overline{\rho \vec{V}'' \vec{V}''}$). La manera de resolver el sistema de ecuaciones es mediante la evaluación del tensor de esfuerzos aparentes de Reynolds mediante algún modelo de turbulencia como el k - ϵ realizable. Este modelo de turbulencia describe el transporte de dos escalares como la energía cinética turbulenta (k) y su tasa de disipación (ϵ). El modelo es sencillo y ha sido validado experimentalmente para muchos flujos reactivos con resultados satisfactorios (Vicente et al., 2005, Lin et al., 2003, Herrmann, 2006). Las simulaciones numéricas son desarrolladas con la alternativa de las ecuaciones promediadas RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) y considera el modelo de turbulencia k - ϵ realizable para el cierre del sistema de ecuaciones que describe el transporte de los dos escalares antes mencionados.

El concepto de “realizabilidad” introducido por Lumley (Recktenwald, G. 2009), significa que el modelo debe cumplir con las situaciones asintóticas y que k y ϵ no deben ser negativos. Este modelo es adecuado para chorros circulares, capas límite con fuertes gradiente de presión, flujos sobre grandes curvaturas y flujos turbulentos. La energía cinética de la turbulencia (k) y su tasa de disipación (ϵ), se obtienen a partir de las ecuaciones de transporte siguientes:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \cdot k \cdot U_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_m + S_k \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \cdot \epsilon \cdot U_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} C_{3\epsilon} G_b + S_\epsilon \quad (17)$$

Dónde la viscosidad turbulenta está dada por:

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + S} \right], \quad \eta = S \frac{k}{\varepsilon}, \quad C_{3\varepsilon} = \tanh \left| \frac{v}{u} \right|, \quad \mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (18)$$

RESULTADOS

Las predicciones numéricas muestran que el flujo de oxígeno (chorro central) tiene un mayor alcance con respecto a los flujos de metano (chorros periféricos) debido a que el de oxígeno tiene mayor cantidad de movimiento, en comparación con el metano, por una mayor densidad y flujo másico. Esta diferencia ocasiona que el flujo central de oxígeno arrastre a los chorros periféricos de metano y por consecuencia, la mezcla de especies tiende a homogeneizarse, aproximadamente, a 11.85 L/dO₂ del reactor.

La densidad de la mezcla de metano-oxígeno es mostrada en la figura 2. Los resultados muestran que la mezcla de especies con concentración principalmente de oxígeno, hasta los primeros 11.85 L/dO₂ del reactor para todos los casos, comienza a alcanzar las concentraciones estequiométricas dentro de los parámetros de los FL. Esto puede observarse en la comparación de los caso de mezcla metano-oxígeno que muestra variaciones en el comportamiento de la curva de densidad, aproximadamente, en los primeros 7.1 L/dO₂. Posterior a está longitud las variaciones de concentración de oxígeno son menores y el flujo tiende a presentar un perfil de concentración uniforme. Esto se debe a que la recirculación generada entre los chorros de metano y oxígeno, así como el efecto de arrastre del oxígeno sobre el metano (figura 3) son los mecanismos dominantes en el proceso de mezcla. La zona de recirculación 2 presenta una mayor amplitud pero su efecto en el mezclado de especies es menor debido a que las concentraciones presentan uniformidad a una distancia aproximada de 14 L/dO₂ para presiones sub-críticas. A presiones súper-críticas (100x10⁵ y 200x10⁵ Pa) su efecto es poco relevante porque las fluctuaciones en las concentraciones son mínimas a una distancia mayor a 8.9 L/dO₂. La razón principal es que a altas presiones el flujo aumenta por efecto de la densidad. Esto ocasiona una mayor turbulencia del flujo y por consiguiente, un mejor proceso de mezclado.

Fig. 2. Densidad de la mezcla a diferentes presiones.

Las simulaciones muestran que para presiones cercanas a la trans-crítica y utilizando la ecuación de estado de gas ideal tanto densidades como núcleos potenciales se desarrollan de manera similar a los resultados obtenidos para 1x10⁵ y 10x10⁵Pa. No obstante la presión crítica del metano que es 50.62x10⁵Pa aproximadamente, los cálculos deben realizarse con la ecuación de estado de gas real ya que su comportamiento varía en función de la presión. Los chorros de metano tienen una contracción del 7%. En cambio como la presión crítica del oxígeno es de 51.61x10⁵ Pa el desarrollo del chorro de oxígeno sufre menos alteración con la utilización de la ecuación de estado de gas real, aproximadamente 2%.

En todos los casos, existen dos zonas de recirculación representadas por las líneas de corriente como puede observarse en la figura 3. Esta figura muestra una zona de recirculación con un alcance aproximado de 5.9 L/dO₂ (zona 1) y otra zona de recirculación cuyo alcance es de aproximadamente 14.8 L/dO₂ (zona 2). La primera zona de recirculación está localizada entre las paredes del reactor y los chorros de metano y presenta una mezcla pobre de oxígeno, aproximadamente de un 20 a un 10% según aumente la presión, permitiendo alcanzar el límite de flamabilidad superior a la salida de los inyectores de metano.

Fig. 3. Líneas de corriente del proceso de mezcla metano-oxígeno.

Fig. 4. Líneas de corriente del proceso de mezcla metano-oxígeno.

La segunda zona de recirculación se ubica entre los chorros de metano y oxígeno con baja concentración de metano aproximadamente de un 11 a un 6% como se muestra en la figura 4, esto permite alcanzar el límite inferior sobre la parte central del chorro de oxígeno. Esta recirculación afecta directamente al efecto de arrastre de los chorros y por consiguiente, la recirculación del flujo y el arrastre del oxígeno sobre el metano son los mecanismos que permiten el mezclado de especies a presiones super-críticas. Sin embargo, la recirculación entre los chorros de metano y oxígeno, así como el arrastre del oxígeno sobre el metano no son los mecanismos dominantes en el proceso de mezcla a bajas presiones.

La figura 5 presenta los contornos de densidad a diferentes presiones y cuyos resultados indican comportamientos ligeramente diferentes entre los casos de 1×10^5 a 50×10^5 Pa y los de 100×10^5 y 200×10^5 Pa. Los contornos muestran que a presiones de 1×10^5 a 50×10^5 Pa, los núcleos potenciales presentan ligeramente un mayor alcance de los chorros (metano y oxígeno) en comparación con los exhibidos a presiones de 100×10^5 a 200×10^5 Pa. Esta situación aparentemente contradictoria se debe a que las fuerzas inerciales de los chorros a alta presión son mayores en comparación con las fuerzas a presiones menores ($P < 50 \times 10^5$ Pa). Este efecto es debido a que los flujos a presiones mayores presentan una mayor turbulencia y por consiguiente, la mezcla mejora, ocasionando que los flujos tengan una mayor interacción y por consiguiente, el alcance de los chorros disminuya. Por otra parte, Cervantes et al. (2012) observaron que el alcance de los chorros es independiente de su fuerza inercial.

El análisis del efecto de la presión en los límites de flamabilidad es mostrado en la figura 6 que exhibe las iso-superficies de fracción de metano en la mezcla. Estas iso-superficies de especie representan los límites de flamabilidad superior, UFL, e inferior, LFL, de la mezcla metano-oxígeno. Estos resultados indican que UFL se alcanza en una mayor región del dominio de cálculo conforme aumenta la presión. Esto se debe a que el UFL aumenta de 61% a 95.66% por efecto de la presión. Sin embargo, en todos los casos analizados, las condiciones necesarias para que las especies presenten la concentración para una posterior reacción exotérmica (combustión) se localiza inmediatamente después de la dispersión de los chorros. Por una parte, el LFL no presenta una influencia significativa por la presión debido a que su valor varía entre 5.2% y 5.46% (figura 6).

Fig. 5. Contornos de densidad a diferentes presiones.

Fig. 6. Isosuperficies de concentración de metano a diferentes presiones. (LFL al borde de la zona azul, UFL al borde de la zona verde).

Esto supone que las condiciones requeridas para que se desarrolle una combustión son prácticamente las mismas para todos los casos. Los resultados obtenidos se deben, principalmente, a que los efectos de recirculación (entre los chorros de metano y oxígeno) y el arrastre de chorros ocasionan que los límites de flamabilidad (inferior y superior) se alcancen, prácticamente, en el borde de los núcleos potenciales de los chorros. En el caso del LFL, la concentración de metano se localiza en el borde del núcleo potencial del chorro de oxígeno por el efecto de arrastre. Por otra parte, en el UFL la concentración de metano se alcanza, sobre el borde de los núcleos potenciales de los chorros de metano.

CONCLUSIONES

La mezcla del combustible con oxígeno se produce a consecuencia de la recirculación que se desarrolla en el flujo oxígeno-metano (zona de recirculación 2) a la salida del quemador y la diferencia de densidad entre el chorro central y los alrededores. Las predicciones numéricas muestran que, el chorro de oxígeno tiene un efecto de arrastre sobre el metano debido a que el chorro central tiene mayor flujo másico. El mecanismo más importante de mezcla de especies a presiones sub-críticas es la recirculación de la zona 2.

El efecto de la presión es poco significativo en el límite de flamabilidad inferior pero afecta de forma sustancial al valor del límite de flamabilidad superior. El mecanismo más importante de mezcla de especies

a presiones super-críticas es la recirculación de la zona 1 debido principalmente a la acumulación de volumen de combustible que provoca que se incremente el arrastre que se presenta en la zona entre las boquillas (a la salida) de metano y la boquilla (a la salida) de oxígeno. Por lo tanto, la presión muestra un efecto poco significativo en el proceso de mezcla por difusión de metano- oxígeno. En ambos casos la zona más relevante para la mezcla de especies y para alcanzar los límites de flamabilidad, es la que está ubicada entre los chorros de metano y el chorro de oxígeno.

NOTACIÓN

LFL	Lower Famability Limit por sus siglas en ingles	P_c	Presión crítica [Pa]
UPL	Upper Famability Limit por sus siglas en ingles	Z_c	Factor de compresibilidad en el punto crítico [adimensional]
C_{st}	Concentración Estequiometrica	$\bar{\rho}$	Densidad media [kg/m ³]
LFL _p	Límite de Flamabilidad Inferior en Función de la Presión	$\vec{V}$	Vector de velocidad [m/s]
UPL _p	Límite de Flamabilidad Superior en Función de la Presión	t	Tiempo [s]
m	Moles de hidrogeno del combustible [mol _h /mol _f]	$\bar{P}$	Tensor de presiones [Pa]
x	Moles de oxígeno del comburente [mol _o /mol _c]	μ	Viscosidad laminar [kg/m·s]
y	Moles de oxígeno en el combustible [mol _o /mol _f]	$\vec{f}_m$	Vector de aceleración gravitatoria medio [m/s ²]
FL	Límite de Flamabilidad	$\bar{\tau}$	Tensor de esfuerzos aparentes de Reynolds ($\bar{\rho} \overline{V^i V^j}$)
FL ₀	Límite de Flamabilidad de Referencia	Y_{xi}	Especie conservativa [mol]
K_{fi}	Constante de flamabilidad	μ_t	Viscosidad turbulenta [kg/m·s]
P	Presión [Pa]	SC	Número Schimdt [adimensional]
V_m	Volumen molar [m ³ /mol]	SC _t	Número Schimdt turbulento [adimensional]
R	Constante de los gases [8.31451 J/mol·K]	Z	Moles de O ₂ / moles de combustible [mol _{o2} /mol _f]
T	Temperatura [K]	L	Longitud característica [m]
a	Constante que corrige el potencial atractivo de moléculas [Nm ⁴ /mol ²]	d	Diámetro interno [m]
b	Constante que corrige el volumen [m ³ /mol]		
T_c	Temperatura critica [K]		

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo proporcionado por el CONACYT, el Instituto de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y a la Escuela Superior de Ingeniería Mecánica (ESIME) Zacatenco del Instituto Politécnico Nacional (IPN).

REFERENCIAS

- Bartok, W. y Sarofim, A. F, Fossil Fuel Combustion, John Wiley and Sons, New York (USA) (1990).
- Benedict, M., George B. Webb, Louis C. Rubin, An Empirical Equation for Thermodynamic Properties of Light Hydrocarbons and Their Mixtures: I. Methane, Ethane, Propane, and N-Butane, J. of Chemical Physics 8 (4): 334–345. (1940).
- Cacua-Madero, Karen Paola y Herrera-Múnera, Bernardo Argemiro. Revisión de la Combustión con Aire Enriquecido con Oxígeno como Estrategia para Incrementar la Eficiencia Energética. ISSN 0123-2126 Ing. Univ. Bogotá (Colombia), 17 (2): 463-482, Julio - diciembre (2013).
- Cervantes, L., Martínez, E., Vicente, W., Salinas, M., Polupan, G., Sánchez, F., De La Cruz, M., Análisis Numérico Del Proceso De Mezcla Oxígeno-Metano En Un Arreglo De Chorros Central-Periférico, XIII Congreso Nacional De Ingeniería Electromecánica Y De Sistemas, IPN (2012).
- Cioncollini, J. Thome, C. Lombardi, Algebraic Turbulence Modeling In Adiabatic Gas–Liquid Annular Two-Phase Flow, International Journal of Multiphase Flow vol. 35, pp. 580-596 (2009).
- Cutrone, L., M. Ihme, M. Herrmann, Modeling of High Pressure Mixing and Combustion in Liquid Rocket Injectors, in Proc. Center for Turbulence Research Summer Program, pp. 269-281 (2006)
- Forman A. Williams: Combustion Theory Series. 2° Ed., Combustion Science and Engineering, (1985).

- Fossi, Marco, A Simple Model to Evaluate Direct Contact Heat Transfer and Flow Characteristics in Annular Two-Phase Flow, *International Journal of Heat and Mass Flow* vol. 16, 272-279 (1995).
- Gaydon, A. G. y Wolfhard, H. G., *Flames, Their Structure, Radiation and Temperature*, John Wiley and Sons, Fourth edition, New York (USA) (1979).
- González, J. C., A. A. Amell, F. J. Cadavid. Características de la Combustión con Aire Enriquecido con Oxígeno y Perspectivas de Aplicación en PYME con Procesos de Alta Temperatura. *Revista Ingeniería e Investigación* Vol. 29 No. 3, 23-28 Diciembre (2009).
- Grech, N. A. Mehdi, P. K. Zachos, V. Pachidis, R. Singh, Effect of Combustor Geometry on Performance of Airblast Atomizer Under Sub-Atmospheric Conditions, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics* vol. 6, pp. 203-213 (2012).
- Herrmann, M., Numerical Simulation of Turbulent Bunsen Flames With a Level Set Flamelet Model, *Combustion and Flame*: 145, 357-375 (2006).
- Jones, G. W., Fire and Explosion Hazards at Temperature and Pressure Extremes, in *Proc 1965 Aiche Inst. Chem. Engr. Symp., Ser. 2*, 99-104 (1965).
- Lewis, B. And Von Elbe, *Combustion, Flames, and Explosion of Gases*, 3rd Ed., Academic Press, (1987).
- Lin, Z. Q., Wei, F., Jin, Y., Numerical Simulation of Pulverized Coal Combustion and NO Formation, *Chemical Engineering Science*: 58, 5161 – 5171 (2003).
- M. Hristova, S. Tchaoushev: Calculation of Flash Points and Flammability Limits of Substances and Mixtures University of Chemical Technology and Metallurgy 23 April (2006).
- Murdock, J. W.. *Fundamental Fluid Mechanics for the Practicing Engineer*, CRC Press, Pp. 25–27. (1993).
- Recktenwald, Gerald. The K-E Turbulence Model Mechanical and Materials Engineering Department Portland State University, Portland August 3, (2009).
- Redlich, Otto; Kwong, J. N. S., On the Thermodynamics of Solutions. *Chem. Rev.* 44 (1): 233–244 (1949).
- Singla, G., Scoufflaire, P., Rolon, C., Candel, S. Trans-critical Oxygen/Trans-critical Or Supercritical Methane Combustion Emc² Laboratory, Cnrs, Ecole Centrale Paris (2004).
- Smith, J. J., G. Schneider, D. Suslov, M. Oswald, O. Haidn, Steady-State High Pressure Lox/H₂ Rocket Engine Combustion, *Aerospace Science and Technology* vol. 11, pp. 39-47, (2007).
- Vicente, W., Salinas-Vázquez, M., Martinez, E., y Rodriguez, A., Numerical Simulation of a Turbulent Lean, Premixed Combustion with an Explicit Algebraic Stress Model, *J. Math. and Statistics*: 1, 86-90 (2005).
- Zabetakis, M. G., *Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors*, Bureau of Mines Washington Dc. Bulletin 627 (1965).
- Zlochower, Isaac A., Gregory M. Green: The Limiting Oxygen Concentration and Flammability Limits of Gases and Gas Mixtures, Pittsburgh Research Laboratory, National Institute for Occupational Safety and Health, Pittsburgh, USA 2009.