UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA

ATOMIZACION Y COMBUSTION DE HIDROCARBUROS LIQUIDOS

JUAN RUBEN VARELA HAM

U. A. M. IZTAPALAPA BIBLIOTECA

TESIS DOCTORAL

92526

1989

AGRADECIMIENTOS

Quiero hacer patente mi agradecimiento al Dr. Eduardo Piña Garza por su valiosa asesoría en mi desarrollo profesional y por la dirección de esta tesis. Asimismo deseo agradecer a los profesores: Dr. Leopoldo García Colin, Dr. Marcos Ley Koo Dr. Francisco Uribe, Dr. Magdaleno Medina, por sus valiosas sugerencias y el apoyo brindado durante la revisión de este trabajo.

Agradezco también el apoyo de la Universidad Autónoma Metropolitana en donde he desarrollado este trabajo.

C O N T E N I D O

INTRODUCCION

CAPITULO PRIMERO
ESTADO DEL ARTE EN LA COMBUSTION DE SPRAYS

1.1 Atomización y Sprays
1.2 El Flujo Turbulento
1.3 Cinética de Combustión
1.4 Sistema Fluido-spray

CAPITULO SEGUNDO
SIMULACION NUMERICA DE UN SPRAY

2.1 Ley del Diámetro Cuadrado
2.2 Fuerzas de Arrastre
2.3 Dinámica de Movimiento
2.4 Método Numérico para el Sistema Fluido-Spray
2.5 Atomización Discreta de Paquetes
2.6 Transitorio para la Formación del Spray
2.7 Algoritmo de Evolución
2.8 Cálculos y Resultados de la Simulación

CAPITULO TERCERO
CINETICA DE COMBUSTION

3.1 Cinética de Combustión de Hidrocarburos
3.2 Cinética Básica de Oxidación
3.3 Condiciones Iniciales
3.4 Representación Matricial de un Paquete
3.5 Resultados de la Combustión

CAPITULO CUARTO
TERMODINAMICA IRREVERSIBLE

4.1 Definición de Variables
4.2 Conservación de la Masa
4.3 Balance de Momento
4.4 Balance de Energía Cinética y Potencial
4.5 Conservación de la Energía Total
4.6 Resumen de Ecuaciones

CAPITULO QUINTO
TEORIA CINETICA PARA SPRAYS

5.1 Modelo Cinético
5.2 Integrales de Colisión
5.3 Ecuaciones Generales de Balance
5.4 Ecuaciones de Balance para los Gases
5.5 Ecuaciones de Balance para las gotas
5.6 Comparación con la Fenomenología

RESULTADOS, CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

BIBLIOGRAFIA

APENDICES

INTRODUCCION

En este trabajo abordamos el problema de la combustión de sprays[1] mediante tres caminos conceptualmente diferentes. Los tres aspectos se complementan y al final se unifican para constituir un modelo formal para el tratamiento de sprays. El primer aspecto es el empírico, que se basa en resultados puramente fenomenológicos y que nos permite, aunque burdamente, acercarnos a la realidad mediante correlaciones y aproximaciones. El segundo aspecto es el hidrodinámico, en donde se conjugan fenómenos de transporte y de transferencia con la dinámica de fluidos, todo ello basado en la termodinámica irreversible del sistema fluido-spray. El tercer aspecto es puramente téorico, se basa en la teoría cinética de gases y nos permite establecer un modelo físico para el estudio de la evolución de la materia dispersa.

El tema que nos ocupa es amplio, existen en la literatura una gran cantidad de trabajos distribuidos en diferentes contextos. Por esta razón hemos dedicado el capítulo primero a la presentación del estado del arte en materia de combustión. Aprovechamos tambien para definir y situar nuestro problema, asimismo para señalar las hipótesis, aproximaciones y restricciones que adoptamos a lo largo del trabajo.

En el capítulo segundo desarrollamos el aspecto empírico para diseñar un algoritmo de simulación, cuyo objetivo es mostrar de manera global los modelos y los métodos de solución que se emplean en este campo. Los resultados de este programa simulador han sentado las bases para el desarrollo de los otros dos aspectos que se analizan

[1] Usamos la palabra spray para referirnos al producto que se obtiene de la atomización de un líquido. Spray no tiene traducción adecuada en Español.

aquí, se utilizarán para probar modelos más completos que usan la teoría aquí expuesta y a su vez constituyen una base de datos de aplicación inmediata en diversos problemas de combustión.

En el tercer capítulo desarrollamos la cinética para la combustión de hidrocarburos. Allí implementamos un programa de cómputo para dar solución a los esquemas de reacciones que proponemos, usando un enfoque matricial para representar al paquete de reacciones. Las ecuaciones diferenciales ordinarias que resultan de tal aplicación se resuelven mediante el método numérico desarrollado por C.W. GEAR e implementado por A. C. Hindmarsh(1974).

En el capítulo cuarto desarrollamos la hidrodinámica de un sistema constituido por una fase gaseosa multicomponente y por varios conjuntos de gotas agrupadas de acuerdo a sus tamaños, denominados aquí como sectores. El objetivo de este tratamiento es construir las ecuaciones de balance para los sectores y para las componentes de la fase gaseosa, imponiendo el cumplimiento de las leyes de conservación globales. Por simplicidad hemos supuesto que las gotas estan constituidas por un líquido puro y que al evaporarse transfieren esa materia a la fase gaseosa. También se incluyen las fuerzas de arrastre que ocurren cuando existe velocidad relativa entre gotas y el flujo de gases. Las ecuaciones de balance obtenidas contienen términos "fuente" que resultan de la interacción entre las gotas y la fase gaseosa. Estas pueden estimarse a partir de la simulación numérica que se presenta en el capítulo segundo, de un modelo detallado para la interacción de las gotas con el fluido ó mediante modelos empíricos.

En el capítulo quinto desarrollamos la teoría cinética para representar al sistema completo fluido-spray mediante funciones de distribución. En este enfoque empleamos dos funciones de distribución, una para las moléculas de la fase gaseosa y otra para las gotas. Esto nos conduce a dos ecuaciones cinéticas, cuyas integrales de colisión involucran a los fenómenos de transferencia. Los objetivos en este

capítulo son, identificar los términos de las ecuaciones cinéticas, proponer modelos físicos para su estimación y construir las ecuaciones de balance para nuestro sistema, mismas que pueden ser comparadas término a término con las obtenidas por medio de la termodinámica irreversible en el capítulo cuarto. Finalmente incluimos una sección de resultados, conclusiones y perspectivas de este trabajo.

CAPITULO PRIMERO

ESTADO DEL ARTE EN LA COMBUSTION DE SPRAYS

El objetivo de este trabajo es el estudio de la atomización y combustión de hidrocarburos. Para lograr la combustión completa es menester, practicar una mezcla perfecta con el oxidante y someterla a su temperatura de ignición. Cuando en condiciones normales el hidrocarburo es gaseoso el proceso no tiene mayor inconveniente, pero si éste es un líquido entonces es necesario evaporarlo previamente. La manera más rápida de evaporar un líquido se logra mediante su atomización en un ambiente de alta temperatura. La atomización rompe la cohesión y la tensión superficial del líquido produciendo un spray. Un spray es un "chorro" de gotas diminutas que salen en formación cónica por la boquilla del atomizador. El tamaño típico de las gotas varía de acuerdo con el combustible, para un hidrocarburo ligero (n-Hexano, n-Heptano, n-Octano e isómeros) el diámetro típico es del orden de 50 a 100 micras (10^{-6}m), sin embargo para hidrocarburos pesados (diesel, combustóleo, parafinas, etc) el diámetro puede ser hasta de 500 micras. Debemos aclarar que un spray difiere de un aerosol justamente por el tamaño de sus gotas, los diámetros típicos de las gotas de un aerosol son del orden de 500 veces un diámetro molecular.

Nuestro trabajo estará enfocado al estudio de un spray que se inyecta paralelamente con un flujo de aire para quemarse dentro de una cámara de combustión. Nos interesa también el flujo reactivo que se forma debido a la evaporación del spray y finalmente, resolver el sistema de ecuaciones que gobiernan el sistema. Nuestro tratamiento se limita al estudio de la hidrodinámica del sistema dejando de

lado los fenómenos radiativos que normalmente aparecen en una flama. El problema así planteado involucra la intervención simultánea de varios fenómenos, de manera que su estudio se ha visto subdividido en varias etapas, algunas de las cuales se han desarrollado paralelamente y de los cuales haremos aquí una breve reseña.

Los primeros trabajos importantes en materia de evaporación y combustión de gotas aisladas, aparecieron por los años cincuentas. Durante el " forth International simposium on combustion" realizado en MIT (Massachusetts Institute of Technology, Cambridge MA, sep 1-5, 1952), se presentaron los trabajos de G.E.A. Godsave (1953), D.B. Spalding (1953), C.A. Gregory (1953) y A.R. Hall (1953), a quienes consideramos como iniciadores del tema que nos ocupa.

Existen en la literatura varios trabajos de revisión, que engloban casi cuarenta años de investigación sobre la evaporación y combustión de gotas y de sprays. Podemos citar los trabajos de Hedley (1972), Williams (1973), Faeth (1977), Law (1982), Faeth (1983) y Sirignano (1983), como los más importantes. A continuación veremos con mayor detalle cual es el estado del arte en los temas que son de interés para el desarrollo de nuestro trabajo.

1.1 Atomización y Sprays

La atomización es un campo cuya principal actividad rinde sus frutos para el desarrollo tecnológico, en donde el objetivo es diseñar y fabricar atomizadores para aplicaciones específicas. De la extensa variedad de atomizadores que existen en el mercado (Dombrowski, 1968), solo nos interesan aquellos que se aplican a la combustión. En su trabajo de revisión, Williams(1976) presenta un panorama completo de la atomización, en donde señala las diversas características de los sprays que producen y las ventajas que ofrecen en la práctica de la combustión. Los atomizadores más utilizados en combustión son aquellos que se

conocen como atomizadores de boquilla (nozzle), que producen un spray cónico y se accionan por aire o vapor a presión. Las características de esos atomizadores han sido revisados por Lefebvre (1980).

Los avances recientes en técnicas LASER (Hess,1984), combinadas con el desarrollo de las técnicas digitales, han dado gran impulso a los aspectos experimental y empírico de la caracterización de sprays. Esto nos permite suponer que en un futuro no lejano, surjan de manera natural, estandares para la clasificación de sprays.

Los sprays se clasifican de acuerdo a la distribución estadística del tamaño de sus gotas. Mugele(1951) presenta una comparación entre los diversos tipos sprays, de acuerdo a las funciones de distribución que los caracteriza. Los sprays han sido estudiados por Fraser(1956), Eisenklam(1961), Fraser(1963) Chigier(1976) y Williams(1976a) entre otros.

No es intención nuestra entrar en los detalles de la clasificación de sprays, ni en la manera de producirlos, lo que nos interesa es conocer su existencia y sobre todo, la estadística que los caracteriza. Nuestro estudio requiere de la información estadística de posición, velocidad, y tamaño de las gotas que constituyen al spray como función del tiempo.

1.2 El Flujo Turbulento

El flujo de aire que se inyecta paralelamente al spray obedece a los requerimientos de oxigeno en la combustión. Los hidrocarburos necesitan aire a razón de aproximadamente quince veces la masa del combustible, que representa un enorme volumen gaseoso si se compara con el volumen del combustible líquido. El gasto de aire en la combustión obliga a introducir flujos a gran velocidad, lo que en la mayoria de los casos produce turbulencias.

El tratamiento de flujos turbulentos en su aplicación a este problema ha sido estudiado por el Prof. D.B. Spalding y sus colaboradores en Imperial College. A ellos se debe (Launder,1972,74) la implementación del modelo $k-\varepsilon$, que ha sido aplicado en diversas circunstancias por Patankar(1970), Pratap(1976) y Singhal(1981). La obra completa de Spalding en el campo de la turbulencia fué publicada por Patankar (1983) con motivo de su sexagésimo aniversario.

El modelo $k-\varepsilon$ genera dos ecuaciones en derivadas parciales del tipo de Navier-Stokes, una para la energía cinética turbulenta k y otra para el parámetro de disipación de energía ε. Esas ecuaciones son complementarias con aquellas que representan a un flujo laminar y para resolverlas se requiere de la información sobre las cantidades fluctuantes del sistema.

Los flujos turbulentos han dejado de ser pesadilla para aquellos que pretenden resolver las ecuaciones de balance correspondientes. Recientemente, Patankar(1970) implementó un programa para dar solución a flujos reactivos turbulentos, mismo que aparece en los apéndices de su libro.

1.3 Cinética de Combustión

La cinética de reacciones se agrega al tratamiento puramente mecánico del flujo para estudiar algunos problemas lacerantes como lo son, la corrosión, la contaminación ambiental y la ineficiencia de la combustión. Como lo anotamos anteriormente, el flujo reactivo es una mezcla gaseosa multicomponente que contiene principalmente: nitrógeno, oxígeno, dióxido de carbono, vapores de combustible y agua. El nitrógeno molecular N_2 presente en el aire que se inyecta en la cámara, no interviene en las reacciones. De manera que para el tratamiento de los compuestos restantes bastaría una cinética de pocas reacciones químicas.

Análisis químicos detallados de productos de combustión, muestran la existencia de ciertos compuestos indeseables, que han sido identificados como los principales agentes de la corrosión y de la contaminación ambiental. La presencia de azufre en el combustible, es motivo suficiente para esperar dióxido de azufre en los gases, mismos que combinados con oxígeno ó radicales de él, producen el trióxido de azufre, que facilmente se convierte en ácido sulfúrico. La combinación de agua y el ácido sulfúrico, ambos productos de la combustión, forman una mezcla corrosiva que ataca fuertemente a las partes metálicas de hornos y calderas.

Por otra parte, la presencia de compuestos nitrogenados en el combustible, se refleja en la producción de los óxidos de nitrógeno, mismos que resultan letales para los humanos que los respiran. A su vez, la presencia de monóxido de carbono en los gases, indica la insuficiencia de oxígeno. Este caso se presenta acompañado de una disminución de la temperatura, representando un claro ejemplo de ineficiencia de la combustión y de contaminación ambiental. Este problema se resolvería facilmente aumentando el caudal de aire a la entrada de cámara, pero hacerlo, implicaría aumentar la probabilidad de la reacción que produce el trióxido de azufre.

Esta problemática solo puede ser estudiada mediante una cinética de combustión adecuada, en cuyos esquemas se incluyan las reacciones que involucren a las especies que deseamos estudiar. La tabla que presentamos a continuación muestra la composición típica de productos de combustión.

TABLA I.1

Composición Típica de Productos de Combustión

Compuestos Mayoritarios (% mol)		Compuestos Indeseables (partes por millón)	
Nitrógeno	75-77 %	Dióxido de Azufre	0-2500 ppm
Dióxido de Carbono	0-23 %	Monóxido de Carbono	0-300 ppm
Agua	0-14 %	Trióxido de Azufre	0-50 ppm
Oxígeno en Exceso	0-3 %	Oxidos de Nitrógeno	0-50 ppm

La cinética de combustión de hidrocarburos ha sido ampliamente estudiada (Gardiner 1980) atendiendo a muy diversos objetivos. Recientemente Gardiner(1984) editó una revisión completa sobre los esquemas de reacciones para hidrocarburos. El estudio de los esquemas de reacción, constituye el punto de partida para examinar los diversos compuestos que aparecen en la combustión. Estos esquemas se traducen en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas (Kallend, 1973), que solo pueden ser resueltas por medio de métodos numéricos y con el apoyo de un sistema de computación poderoso. En este trabajo, desarrollamos un algoritmo general para la solución de un esquema en donde interviene una cantidad variable de reacciones químicas (Varela, 1984). Nos hemos basado en un esquema de reacciones básicas propuesto por Billigsley (1973) y que ha sido probado en diversas condiciones (Farías 1982).

1.4 El Sistema Fluido-Spray

En un trabajo de revisión reciente, Faeth (1983) recoge los modelos y métodos de solución para la evaporación y combustión de sprays que clasifica en dos grandes divisiones, de acuerdo a ciertos conjuntos de hipótesis. Los modelos mejor desarrollados pertenecen a la clasificación denominada por Faeth como: "Flujos Localmente Homogeneos" (FLH). Estos modelos se basan en ciertas aproximaciones que dejan de lado la presencia de las gotas. A la otra clasificación le denomina: "Flujos Separados" (FS) en donde, "la historia de la vida de las gotas" no puede despreciarse.

La aproximación FLH supone que las gotas son infinitamente pequeñas y que se dejan arrastrar facilmente por el flujo de gases, lo que permite considerar a las gotas como fuentes puntuales de masa e ignorar la transferencia mútua de momento entre el fluido y las gotas del spray. La transferencia de materia es uni-direccional (de las gotas hacia el fluido), y es causada por la transferencia de calor que los gases transmiten a las gotas. La energía que las

gotas reciben del ambiente provoca el cambio de fase del líquido, los vapores formados escapan de la gota llevando consigo su energía interna, sin provocar acumulación de calor en la gota, ello permite suponer que existe un balance local de energía. FLH supone la existencia de equilibrio Líquido-Vapor, con lo cual abre la posibilidad de aplicar los bien conocidos métodos de Prausnitz(1968) de la ingeniería química. El equilibrio químico entre especies también esta presente en los modelos FLH, lo que permite considerar reacciones químicas reversibles.

Finalmente, los modelos FLH pueden representarse mediante un sistema de ecuaciones diferenciales parciales independientes del tiempo, que contienen las aproximaciones antes señaladas y pueden ser resueltas mediante algún método numérico adecuado, por ejemplo, "Diferencias Finitas". La difusión se considera despreciable respecto a otros efectos como lo es la turbulencia que, en el caso de FLH, puede ser incluida mediante modelos, que se traducen en ecuaciones diferenciales parciales, del mismo tipo que las de Navier-Stokes. Los modelos de turbulencia mejor desarrollados para este campo son los de Launder (1972), Spalding (1978) y que recientemente han sido perfeccionados por los colaboradores de este último (Patankar 1983).

En los modelos FS, se aborda de manera detallada el estudio del comportamiento de las gotas y su entorno. Una gota que sale de la boquilla del atomizador, "viaja" a lo largo del spray atravezando regiones de diversas características, que afectan de manera determinante su evaporación y por ende, su tiempo de vida, haciendo que éste dependa fuertemente de la historia de la gota.

La velocidad y la trayectoria de una gota estan determinadas por las fuerzas que actúan sobre ellas. Las fuerzas que modifican el estado de movimiento de las gotas, son causadas esencialmente por el "arrastre" de los gases.

El aspecto más importante en los modelos FS es el tratamiento estadístico de la enorme cantidad de gotas que

contiene un spray. Los detalles de este aspecto y de los modelos FS en general, representan la parte medular del capítulo segundo de este trabajo.

Por último, nos resta citar que los modelos FS representados mediante funciones de distribución, nos permiten desarrollar una teoría estadística, como la que proponen Williams (1965,1985) y Sirignano (1986), cuyos detalles estan descritos en el capítulo quinto.

CAPITULO SEGUNDO

SIMULACION NUMERICA DE UN SPRAY

El punto de partida para la simulación de la evolución de un spray, es el estudio de los modelos físicos que predicen fenómenos de transferencia entre una gota aislada y sus alrededores. Nos referimos, por una parte, a modelos de evaporación, que involucran transferencia de calor y de masa entre la gota y una atmósfera gaseosa de alta temperatura, y por el otro a modelos de arrastre, que implican transferencia de momento. Como siguiente paso, aplicamos una dinámica de movimiento a las gotas, y observamos de manera determinista la evolución de todas y cada una de ellas. El objetivo que se persigue con esta simulación, es estudiar el comportamiento del conjunto representativo de gotas en un cierto elemento de volumen del spray.

2.1 La ley del diámetro cuadrado

La ley del diámetro cuadrado rectilíneo es resultado del estudio de la evaporación de gotas aisladas, sumergidas en ambientes gaseosos y estancados. Esta ley empírica comenzó a tomar forma a partir del trabajo de Langmuir (1918), quien encontró que la razón de pérdida de masa de la gota es proporcional al radio de la misma. La forma más común de presentar esta ley es la siguiente:

$$d^2 = d_o^2 - \lambda t \qquad (2.1)$$

en donde d_o y d son los diámetros inicial y final de la gota respectivamente, t es el tiempo transcurrido y λ es una constante que depende de la naturaleza de la gota y de las condiciones ambientales, se conoce como la constante de evaporación y sus datos típicos se muestran en el apéndice A.

En el aspecto experimental, la ley del diámetro cuadrado ha sido ampliamente verificada por Godsave(1953) y otros, mientras que en el aspecto téorico Spalding(1953) la deduce en base a una aproximación denominada "estacionaria". Esta aproximación implica resolver las ecuaciones de balance de masa y de energía, conduciendo a una expresión para la constante de evaporación λ como sigue:

$$\lambda = \frac{8}{c}\frac{k}{\rho_L} \mathcal{L}n\,(\,1 + B\,) \qquad (2.2)$$

donde k y c son la conductividad térmica y la capacidad calorífica del vapor en las inmediaciones de la gota respectivamente, ρ_L es la densidad del líquido y B es el número de transferencia.

El número de transferencia B depende de las condiciones ambientales que envuelven a la gota, esto es, temperatura, presión, concentración de oxígeno, etc.. Este parámetro B también depende de la estequiometría en casos de combustión, para lo cual existen en la literatura (Hedley,1972) diversos modelos que permiten su cálculo. En este trabajo tomamos como base el modelo original de Spalding para la estimación del número de transferencia.

$$B = \frac{H}{Q}\frac{M_{ox}}{\nu} + \frac{c}{Q}\,(T_A - T_B) \qquad (2.3)$$

donde H es el calor de combustión, Q es el calor latente a la temperatura de ebullición del líquido, ν es la razón estequiométrica oxidante/combustible, T_A y T_B son las

temperaturas de la atmósfera y de la superficie de la gota respectivamente y Mox es la concentración de oxígeno.

En la combustión de una gota aislada inmersa en una atmósfera estacionada se presenta el efecto de convección natural, que rompe con la supuesta simetría esférica adoptada en la aproximación estacionaria. La convección natural aumenta la razón de pérdida de masa de la gota (Agoston,1956), esto es, el arrastre provocado por convección modifica la constante de evaporación . El efecto ha sido estimado de manera semiempírica, pero aquí no nos ocupamos de la convección natural, ya que nos interesan movimientos convectivos forzados, que involucran velocidades relativas apreciables, como lo veremos en la siguiente sección

2.2 Las Fuerzas de arrastre

Cuando existe un movimiento relativo entre la gota y el ambiente que le rodea, aparecen efectos que modifican fuertemente el proceso de evaporación y que cambian el estado de movimiento. Para estudiar estos casos es necesario acudir primeramente a la ley de Stokes (1851):

$$\vec{F} = 3\pi\mu d(\vec{u} - \vec{v}) \qquad (2.4)$$

donde $\vec{F}$ es la fuerza que ejerce el flujo de gases sobre una esfera sólida de diametro d, μ y $\vec{u}$ son la viscosidad y la velocidad de los gases respectivamente, $\vec{v}$ es la velocidad de la esfera. Una forma alternativa de escribir la ley de Stokes, es en términos del coeficiente de arrastre C_D, que además permite extender su aplicación para números de Reynolds grandes:

$$\vec{F} = \frac{\pi}{8}\rho d^2 C_D |\vec{u} - \vec{v}| (\vec{u} - \vec{v}) \qquad (2.5)$$

esta ecuación coincide con (2.4) cuando $C_D = 24/R_E$, donde R_E es el número de Reynolds, definido como sigue:

$$R_E = \frac{\rho}{\mu} d|\vec{u} - \vec{v}| \qquad (2.6)$$

La ecuación (2.5) con valores adecuados para el coeficiente de arrastre C_D hace posible el tratamiento de una variedad de regímenes que van desde R_E=1 hasta R_E=2000. Para un gran número de casos la expresión que propone Ingebo(1956) para el coeficiente de arrastre, resulta apropiada y nosotros la adoptamos para nuestras estimaciones, ella es:

$$C_D = 27\ R_E^{-0.84} \qquad (2.7)$$

esta expresión es válida para $6 < R_E < 400$. El coeficiente de arrastre disminuye (Eisenklam,1967) cuando existe transferencia de masa entre la gota y el flujo de gases. Este efecto aparecerá siempre en el estudio de la evaporación de sprays, para lo cual disponemos de una expresión propuesta por Spaldig(1959).

$$C_{DM} = C_D \frac{\mathcal{L}n(1+B)}{B} \qquad (2.8)$$

donde C_{DM} es el coeficiente de arrastre en presencia de transferencia de masa. En trabajos recientes (Abramzon,1987) se sugiere que el factor $(1 + B)^{-0.7}$ produce mejores resultados que los de Spalding. Este factor pretende tomar en cuenta todos los efectos que ocurren en la transferencia de masa, momento y energía entre la gota y el flujo de gases que la arrastran.

En el tratamiento de sprays es necesario introducir los efectos de la interacción entre gotas que se

evaporan en una cierta vecindad. Algunos autores (Rex,1956; Iinuma,1962) han estudiado estos efectos (ver apéndice A) incluyendo la combustión. Estos resultados están ligados a la medición de la velocidad de propagación de la flama y obviamente quedan condicionados por la disponibilidad de oxígeno en la vecindad. Otros autores, Labowski (1980) y Omemura (1981), han estudiado el problema desde un punto de vista formal. Sus resultados sugieren, que la reducción en la separación de las gotas conduce a una disminución en la transferencia de masa. Recientemente Patnaik(1986), Raju(1987) y Saitoh(1980,1984) han abordado el problema desde el punto de vista numérico y aunque sus resultados aún no puedan aplicarse de manera sistemática en el tratamiento global de un spray, es de esperarse que pronto se llegará a una expresión general que describa la dependencia de la constante de evaporación en términos de la concentración de gotas. En este trabajo no incluimos estos efectos, pues aunque ello es posible, aumenta de manera considerable la cantidad de cálculos en el tratamiento que deseamos implementar.

2.3 Dinámica de movimiento

La simulación numérica de la evolución de un spray involucra necesariamente el aspecto determinista del movimiento individual y los cambios que ocurren en las gotas. Las ecuaciones de evolución que nos interesan son aquellas que describen el cambio de posición, de velocidad y del tamaño de las gotas. Estas ecuaciones son imposibles de obtener analíticamente debido a la irregularidad de las condiciones a las que estan sujetas las gotas a lo largo del spray. Para salvar esta situación es necesario introducir la hipótesis de que, en un periodo de tiempo Δt suficientemente pequeño ($\Delta t \approx 0.001$ seg), es posible considerar que el movimiento de las gotas es rectilíneo y uniformemente acelerado. El criterio para escoger el tamaño de Δt a usar en nuestros cálculos, está relacionado con el "tiempo de vida" de la gota más pequeña que podamos manejar en nuestro

sistema (diámetro ≅ 20 micras) y podemos señalar que para una $\lambda \cong 0.01\ cm^2/seg$, ese tiempo es del órden de 0.0004 seg.

De esta manera aplicamos las ecuaciones clásicas de movimiento y la ecuación de pérdida de masa de las gotas (Ley del diametro cuadrado) para intervalos de tiempo cortos. Esto nos permite predecir la posición, velocidad y radio de las gotas a partir de sus condiciones iniciales. Consideremos una gota de radio R_o, en la posición $\vec{x}_o$ y con velocidad $\vec{v}_o$. De acuerdo con la Ley del diametro cuadrado:

$$R^2 = \left[R_o^2 - \frac{\lambda}{4} \Delta t \right] \qquad (2.9)$$

donde R es el radio final y Δt es el tiempo transcurrido. La velocidad final $\vec{v}$ y la posición final $\vec{x}$ se calculan de acuerdo con las ecuaciones clásicas de la mecánica de Newton, esto es:

$$\vec{v} = \vec{v}_o + \vec{a}\, \Delta t \qquad (2.10)$$

$$\vec{x} = \vec{x}_o + \vec{v}_o \Delta t + \frac{\vec{a}}{2} (\Delta t)^2 \qquad (2.11)$$

donde $\vec{a}$ es la aceleración que los gases imponen sobre la gota y cuyo cálculo se hace a través de la fuerza de arrastre. La masa inicial de la gota m_o se expresa como sigue:

$$m_o = \frac{4}{3} \pi \rho_L R_o^3 \qquad (2.12)$$

donde ρ_L es la densidad del liquido que constituye a la gota. Usando $\vec{F} = m_o \vec{a}$ e identificando la fuerza con (2.5) se obtiene una expresión para la aceleración de la forma:

$$\vec{a} = \frac{3}{8}\frac{\rho}{\rho_L}\frac{C_D}{R_o}|\vec{u} - \vec{v}_o|(\vec{u} - \vec{v}_o) \qquad (2.13)$$

Por otra parte, la cantidad de materia $\dot{m}$ que pierde la gota puede calcularse como sigue:

$$\dot{m} = 0.5\pi\rho_L R\lambda \qquad (2.14)$$

esta fórmula es particularmente útil cuando se desea estimar las "fuentes" de masa de la fase gaseosa que envuelve a las gotas. Para concluir esta sección solo nos resta indicar que las ecuaciones arriba citadas se aplican a cada una de las gotas presentes en un elemento de volúmen dado.

2.4 Método Numérico para el Sistema Fluido-Spray.

Desde el punto de vista computacional, un spray puede verse como una colección de registros, en donde cada registro corresponde a una gota. Los registros contienen la información sobre el diámetro, la velocidad, la posición y el tiempo de residencia de una gota en el seno del spray. El flujo de gases que acompaña al spray, puede estudiarse por medio de "celdas". Las celdas son porciones (independientes) de espacio de cierta forma y tamaño finito, perfectamente localizadas; en conjunto, ocupan todo el "campo" hidrodinámico que se estudia. Para efectos de cómputo y para evitar confusiones con los registros de gotas, empleamos la misma palabra "celda", para designar al conjunto de datos asociados a la fase gaseosa. Cada celda contiene como mínimo, para el caso estacionario, la información sobre velocidad, densidad, y temperatura de los gases.

En el contexto hidrodinámico, el empleo de celdas persigue una descripción de carácter Euleriano para el fluido, mientras que los registros de gotas presentan la

descripción Lagrangiana del spray. Esas descripciones no son independientes y justamente estamos interesados en la información referente a la interacción que intrínsecamente existe entre ellas, que para un fluido homogeneo estaría dada por el teorema de transporte de Reynolds (Currie,1974). Observaremos a las gotas en su tránsito por una celda y nos preguntaremos acerca de los cambios que sufren éstas a causa del fluido, y por los cambios que experimenta el fluido por causa de las gotas.

Los cambios en las gotas se calculan mediante la dinámica expuesta en secciones anteriores, que consiste principalmente en una ley empírica de evaporación y otra de arrastre, mismas que dependen de las condiciones del fluido y que se aplican de manera individual a cada una de las gotas. Los cambios en el fluido pueden calcularse en base a la contribución de efectos que cada una de las gotas ejerce sobre el fluido. Particularmente nos referimos a la cantidad de masa que pierden las gotas por evaporación, al momento total que pierde o gana el fluido por arrastre y a la energía cinética que pierden ó ganan las gotas por esta misma causa.

El manejo independiente de registros y celdas nos permite hacer una clara distinción entre el fluido y el spray, pero nuestro interés esta centrado en predecir lo que le ocurre al fluido en una celda y muy especialmente, en el cálculo sobre su enriquecimiento de combustible. Fenomenológicamente, las gotas pueden verse como "fuentes" de materia para la fase gaseosa, mismas que toman su lugar en las ecuaciones de balance de esa representación. Las "fuentes" de momento y de energía también se calculan para completar el conjunto de datos que representa el objetivo principal de este procedimiento. Otra aportación al problema hidrodinámico, es el cálculo de las diferencias que se establecen entre dos celdas contiguas. Esta información se obtiene del análisis de las dos celdas en cuestión, y es especialmente útil cuando se desea resolver las ecuaciones de balance correspondientes.

Debemos señalar dos aspectos importantes en la aplicación de la dinámica, ambos relacionados con el número

total de gotas presentes en un cierto instante. La población de gotas es cambiante, porque de manera intermitente aparecen gotas nuevas por la boquilla del atomizador ($\vec{x}$=0), y también, porque desaparecen debido a evaporación las gotas más pequeñas del conjunto. Cabe esperar, que después de un cierto tiempo t_s, la variación temporal del número total de gotas, oscile alrededor de una cantidad promedio. El otro aspecto se relaciona con el transitorio de formación del spray, que ocurre cuando aún no existe éste (t=0), y persiste hasta que se alcanza un estado "casi" estacionario ($t=t_s$). Este detalle nos ha obligado a dividir nuestra tarea en dos partes, la primera para construir el spray *mismo* y la segunda, para examinarlo.

2.5 Atomización Discreta de Paquetes (ADP)

La atomización discreta de paquetes es un procedimiento numérico que pretende "simular" las funciones de un atomizador. La técnica consiste en generar (N_G) registros, colocarlos en el origen del sistema de coordenadas ($\vec{x}$=0) y asignarles un tiempo de residencia (t_r=0). Los datos sobre diámetro y velocidad se asignan de manera estadística, obligando a que se respeten distribuciones específicas.

La frecuencia de atomización (F_A) y la cantidad de registros (N_G) de cada paquete, son parámetros arbitrarios. Estos se escogen a conveniencia, procurando ajustar con las características de un atomizador real, lo que permite practicar la simulación numérica y corroborar experimentalmente nuestros resultados. Por simplicidad y para efectos de prueba, en este trabajo generamos mil paquetes (F_A=1000) de cien gotas (N_G=100) en cada segundo de tiempo real.

Nuestro algoritmo asimila la información estadística sobre diámetros y velocidades en forma de histogramas de doce barras como el que se muestra en la figura 1. En rigor ese histograma debe representar la

distribución de tamaños de una muestra de cien gotas, justo a la salida de un atomizador, pero hemos idealizado el problema para ilustrar el procedimiento y comprobar los resultados del programa. En este caso usamos un histograma simétrico que pretende representar la distribución normal.

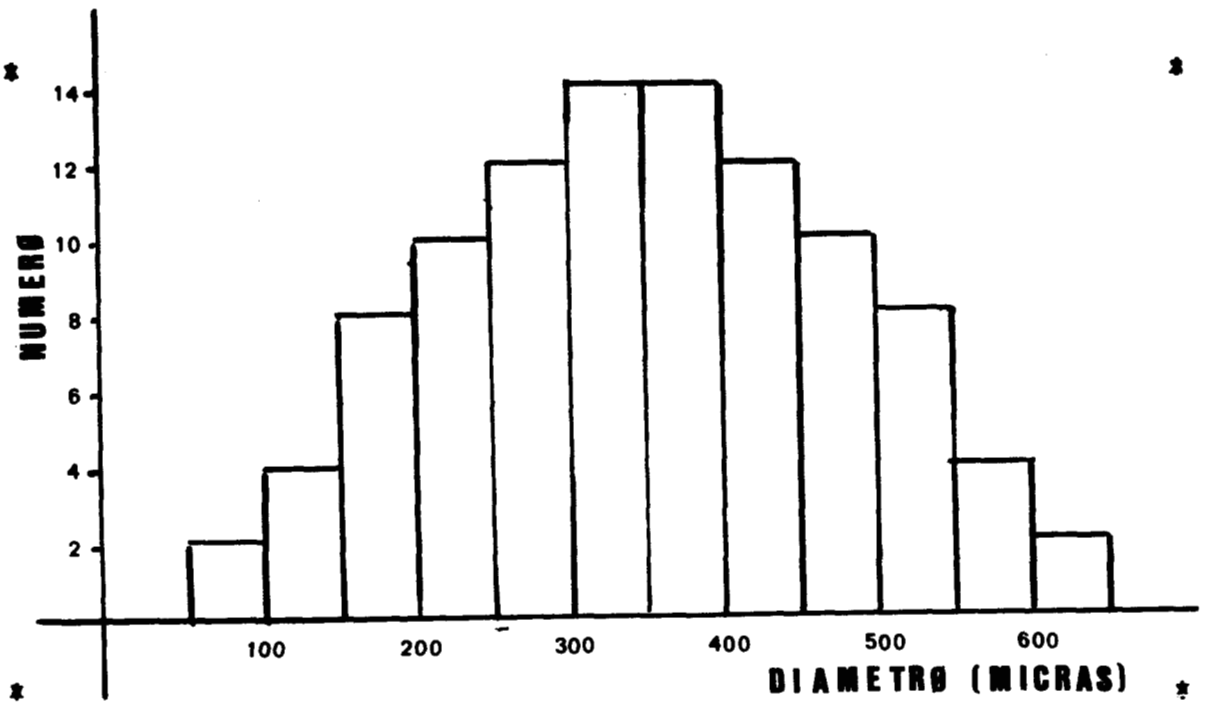


Figura 1, Histograma de un paquete de cien gotas

Los parámetros que caracterizan a ese histograma son básicos en la generación de los paquetes. Sus barras contienen sucesiva y respectivamente, 2, 4, 8, 10, 12, 14, 14, 12, 10, 8, 4 y 2 elementos cada una. Comprobamos que la suma de ellos es cien y que los tamaños representativos que limitan a las barras son: 50-100, 100-150, 150-200, 200-250, 250-300, 300-350, 350-400, 400-450, 450-500, 500-550, 550-600 y 600-650 (micras) respectivamente. Esta información es suficiente para generar los cien diámetros que han de anotarse en los correspondientes registros del paquete. Un procedimiento semejante se sigue para la generación de cien velocidades, para lo cual se requiere del histograma de velocidades correspondiente.

Describimos a continuación el procedimiento numérico para generar los cien diámetros, para lo cual contamos con dos fórmulas simples que nos proporcionan números enteros aleatorios en el intervalo de cero a mil:

$$N^{\#}_{i+1} = 13\, N^{\#}_{i} + 101 \qquad \text{MOD}(1000) \qquad (2.15)$$

$$M^{\#}_{i+1} = 17\, M^{\#}_{i} + 113 \qquad \text{MOD}(1000) \qquad (2.16)$$

donde $N^{\#}_{i+1}$ y $M^{\#}_{i+1}$ son números aleatorios que se calculan a partir de los valores anteriores $N^{\#}_{i}$ y $M^{\#}_{i}$ respectivamente. Los números generados mediante estas fórmulas, no se repiten en un periodo de mil números sucesivos. Esta forma de generar números aleatorios es la más simple y rápida pero presenta algunos inconvenientes (Press,1986) al practicar análisis estadísticos rigurosos a las correlaciones de los números obtenidos. Existen en la literatura especializada métodos que ayudan a corregir diversas problemáticas (Press,1986), que pudieran incorporarse en nuestra simulación, pero por simplicidad hemos empleado un procedimiento que genera conjuntos de números que obedecen distribuciones arbitrarias como la que presentamos eo el histograma anterior, mismo que pretende representar las características de un atomizador real.

Los primeros elementos del paquete que deseamos construir, son aquellos que conforman la primera barra del histograma. Son dos elementos, cuyos diametros caen en el intervalo comprendido entre 50 y 100 micras. Para ello generamos dos números aleatorios mediante la fórmula (2.15), mismos que mapeamos en el intervalo correspondiente. Para la segunda barra se requieren cuatro números aleatorios, que mapeamos en el intervalo (100-150). La operación se repite para cada barra del histograma, hasta completar el paquete de cien gotas. La fórmula (2.16) la reservamos para generar las cien velocidades del paquete de gotas.

2.6 Transitorio para la Formación del Spray (TFS)

Necesitamos dar una representación matemática al spray, que hacemos en base al conjunto de registros que

contienen la información de todas las gotas que lo constituyen. Esto, desde el punto de vista computacional, es una base de datos. Consideremos al spray, como un arreglo $\mathbb{D}[N_T,L]$, en donde N_T es el número total de gotas del spray que existen en un cierto instante t, y L un indicador de propiedades, como lo son: el radio (L=1), la posición (L=2), la velocidad (L=3), etc., de las gotas.

Por simplicidad, consideramos un problema unidimensional. Esta simplificación, no restringe nuestra aplicación, pues a nivel de cálculos de computadora, estamos hablando de dos ó más instrucciones de programación extras por gota. Y aunque el tiempo de computación involucrado aumenta considerablemente con la dimensionalidad del problema, en este momento no nos importa, porque estamos interesados solamente en ilustrar el tratamiento que daremos a la base de datos $\mathbb{D}[N_T,L]$ que nos representa al spray.

Necesitamos también, una representación para el lugar físico por donde transitan las gotas y los gases. Para ello introducimos el concepto de "celdas", que nace de una subdivisión del espacio y que interpretamos como porciones de espacio, inamovibles y de tamaño fijo. El conjunto de N_c celdas abarcan todo el espacio hidrodinámico, no se intersecan entre sí, y pueden representarse también, como una base de datos $\mathbb{C}[N_c,L]$, en donde L es también un indicador de propiedades hidrodinámicas del gas, como lo son la densidad (L=1), la temperatura (L=2), la velocidad (que en el caso unidimensional corresponde a L=3), y las concentraciones de las especies en caso de mezclas (L=4, 5, etc.).

Ahora nos abocamos a la formación del spray, recordando que al tiempo t=0 no existen aún las gotas del spray y que por tanto, la base de datos $\mathbb{D}[0,3]$ se encuentra vacia. Mediante el procedimiento ADP (descrito en la sección anterior) generamos un primer paquete de gotas, cuyos registros anexamos a la base de datos, que ahora contiene cien filas, correspondientes a las cien gotas del primer paquete que "atomizamos".

El siguiente procedimiento es aplicar la dinámica a las gotas durante un periodo de tiempo Δt de atomización, en donde suponemos que cada paso de ADP involucra un intervalo de tiempo Δt de un milisegundo, que es un tiempo apropiado para la atomización de paquetes de cien gotas. A este procedimiento también le denominamos "AVANCE", pues el resultado de la aplicación dinámica es un avance de las gotas en su posición.

Si hacemos un breve análisis a la base de datos del spray después de aplicar la dinámica, notaremos que todas las gotas han cambiado de posición, velocidad y han disminuido de tamaño. Cuando el tamaño de las gotas es muy pequeño (menor que 20 micras de diámetro), la transferencia de momento entre esas gotas y el fluido es despreciable. Esto se debe principalmente a que dicha transferencia depende de la velocidad relativa y de la masa de la gota, siendo ambas muy pequeñas. Para este caso las gotas y el fluido forman localmente un medio casi homogeneo y estaríamos dentro de los límites de la aproximación FLH. Estas consideraciones nos permiten eliminar de nuestra simulación a las gotas de menor tamaño; a su vez, ello constituye un límite para nuestra aproximación. Este procedimiento de "depuración", que elimina a las gotas "muertas" de la base de datos, nos permite optimizar los cálculos de manera significativa.

Así pues, para construir un spray son necesarios tres pasos lógicos de computación que se repiten tantas veces como convenga. Los pasos son; i) atomizar mediante el procedimiento ADP y añadir la información generada a la base de datos $\mathbb{D}$, que representa al spray, ii) aplicar la dinámica a la base de datos durante un periodo Δt y iii) practicar una depuración en la base de datos. Después de aplicar el último paso, es menester conocer el número total de gotas presentes en el spray.

Si hacemos un análisis del número total de gotas después de cada depuración, notaremos que esa cantidad crece de manera sostenida durante los primeros pasos, pero después de un cierto tiempo, deja de crecer y comienza a oscilar

alrededor de una cantidad promedio. Cuando esto ocurre, decimos que el spray se encuentra en un estado "pseudo-estacionario", que representa para nosotros un spray formado y suceptible de ser estudiado.

No hemos querido aplicar para el spray el término "estacionario", debido a la cantidad tan grande de elementos que lo constituyen. Por esa razón y para evitar conjeturas innecesarias, emplearemos la palabra pseudo-estacionario.

El spray pseudo-estacionario y representado mediante una base de datos , constituye el punto de partida para el análisis estadístico de las gotas y su interacción con los gases que las rodean. A los gases, por decirlo así, los hemos encasillado en celdas, para las cuales tenemos también una representación en base de datos. Ahora es posible preguntarse cúantas gotas transitan por una celda y cúanta materia dejan en ella durante un periodo Δt. También es posible preguntarse sobre la fuerza de arrastre que ejercen los gases sobre las gotas en una celda en particular.

La respuesta a la primera pregunta, se obtiene examinando la base de datos $\mathbb{D}$ del spray y estableciendo una relación con la base de datos $\mathbb{C}$ del campo, de acuerdo a la posición de las gotas. De esta manera calculamos el número de gotas N_c que en el instante t transitan por la celda c. La segunda respuesta se obtiene aplicando selectivamente la dinámica de evaporación, a las gotas asociadas a la celda y recordando que la dinámica esta afectada por las condiciones hidrodinámicas del fluido encasillado en la celda en cuestión. La respuesta a la tercera pregunta resulta evidente, se obtiene aplicando selectivamente, la ley de Stokes modificada (2.5) a cada una de las gotas.

Las preguntas y respuestas planteadas en el párrafo anterior, son materia de cálculo sobre la interacción entre las gotas del spray y los gases. Esos cálculos deben realizarse para todas las celdas y repetirlo por periodos Δt, tantas veces como se haga necesario. Naturalmente que

ésta, es una tarea para computadoras, en donde nosotros debemos diseñar los programas que realizen los procedimientos mencionados y preocuparnos principalmente de afinar nuestros métodos para el análisis de resultados. A este respecto podemos decir, que no resulta práctico analizar al spray y a las celdas en cada paso de atomización ADP, ya que esto implicaría intervenir cada vez, en las bases de datos $\mathbb{D}$ y $\mathbb{C}$ respectivamente. Hemos diseñado matrices de interacción que construimos a partir de las bases de datos, que contienen información especifica, y que se emplean solo cuando se hace necesario. Eso nos ahorra tiempo de computación permitiéndonos seguir de cerca la evolución y calcular la variables más relevantes de nuestro sistema. El desarrollo de esas matrices lo haremos en la sección siguiente.

2.7 Matrices de Interacción

Para el análisis de resultados y sobre todo para visualizarlos, emplearemos histogramas de doce barras. De igual manera que en el caso de la sección 2.5, definimos los radios característicos $\hat{R}_k$ como sigue:

$$\hat{R}_k = k \frac{R_{max}}{12} \qquad (2.17)$$

en donde R_{max} es el máximo valor que puedan tener los radios de las gotas, k es un número $(k=1,..,12)$ que nos indica también el número de la barra. Definimos también el ancho de la barra como $\hat{R}_k \pm \Delta\hat{R}_k$ en donde,

$$\Delta\hat{R}_k = \frac{R_{max}}{24} \qquad (2.18)$$

Para que cualquier gota de radio R en el intervalo $(0-R_{max})$ pueda ser asignada a un cierto radio $\hat{R}_k$ característico, es necesario despreciar a las gotas cuyos radios sean menores a

un radio mínimo R_{min}. De manera práctica, hemos escogido

$$R_{min} = \frac{R_{max}}{24} \qquad (2.19)$$

y ahora sí, podemos asegurar que todas las gotas en el intervalo (R_{min}-R_{max}) podrán ser alojadas en las diversas barras ($k=1,\ldots,12$) que ponemos a su disposición.

Dividimos el espacio hidrodinámico en cincuenta celdas. Esta partición obedece a experiencias tomadas de las pruebas realizadas con el programa SAtom 1.4 (Varela,1989) para algunos sprays. Esa cantidad de celdas resulta práctica, pues sin perder mucho detalle, reduce en gran medida el tiempo de computación. No hace falta decirlo pero, si la partición propuesta resulta inadecuada para algún caso específico, puede cambiarse, y su readaptación en el programa es una tarea simple.

Para definir el tamaño de las celdas, es necesario conocer de antemano el tamaño del spray en el estado pseudo-estacionario. Este último dato no requiere precisión, se obtiene de un análisis cualitativo del spray. Lo importante aquí, es dar margen para que el campo que estamos definiendo, pueda contener a todas las gotas del spray y que dicho tamaño ya no cambie significativamente con el tiempo. Esto último queda asegurado para un spray pseudo-estacionario.

Así pues, definimos la celda $\hat{C}_x$ como un elemento de volumen, cuyo tamaño y dimensionalidad estarán dados por las condiciones del problema. En nuestro caso unidimensional, la posición $\hat{C}_x$ y el tamaño $\hat{C}_x \pm \Delta\hat{C}_x$ de una celda, estarán dados por;

$$\hat{C}_x = x \frac{X_{max}}{50} \qquad (2.20)$$

$$\Delta\hat{C}_x = \frac{X_{max}}{100} \qquad (2.21)$$

en donde $x=1,..,50$ y X_{max} es el tamaño característico del spray. De esta manera, las gotas cuya posición este comprendida en el intervalo $\hat{C}x \pm \Delta\hat{C}x$ pertenecen a la celda $\hat{C}x$

Definimos ahora los arreglos N[50x12], V[50x12] y K[50x12] en cuyos elementos [x,k] depositamos la información sobre el número, la velocidad promedio y el promedio de las velocidades cuadradas de las gotas de tamaño k que contiene la celda x respectivamente. Estos arreglos deben construirse a partir de la base de datos D del spray.

Las propiedades del spray como pueden ser la masa, el momento y la energía cinética de las gotas en una celda, pueden obtenerse directamente de estos arreglos, que por comodidad llamamos matrices de propiedades. La manera de obtener la información citada es la siguiente: i) la masa total de las gotas de tamaño k se obtiene multiplicando el cubo del radio característico $\hat{R}_k$ por el factor constante $\frac{4}{3}\pi\rho_L$ ii) el momento se obtiene multiplicando la masa por la velocidad promedio y ii) la energía cinética es un medio de la masa por el promedio de las velocidades cuadradas. Así pues,

$$M_a[x,k] = \frac{4}{3}\pi\rho_L \hat{R}_k^3 N[x,k] \qquad (2.22)$$

$$M_o[x,k] = \frac{4}{3}\pi\rho_L \hat{R}_k^3 N[x,k]V[x,k] \qquad (2.23)$$

$$E_c[x,k] = \frac{1}{3}\pi\rho_L \hat{R}_k^3 N[x,k]K[x,k] \qquad (2.24)$$

Como puede notarse claramente, las filas de las matrices de propiedades son histogramas para una celda, que pueden ser analizadas por algún método gráfico. Al final de esta sección presentamos algunas gráficas que contienen histogramas de número, velocidad y cuadrados de velocidad para distintas celdas. Hemos de aclarar que el empleo de este método gráfico, solo sirve para "visualizar" lo que ocurre al spray en determinado momento. Ello implica intervenir a la

base de datos del spray, construir las matrices y finalmente graficar los histogramas.

Para contruir las matrices de interacción, se requiere de la base de datos del spray a un tiempo t y aplicarle la dinámica durante un cierto intervalo de tiempo Δt. Concretamente nos interesa saber:

a) Cúantas gotas de tamaño k se convierten en $k-1$
b) Cúantas gotas de tamaño k cambian de celda
c) A cúantas gotas de tamaño k le ocurren a) y b), y
d) A cúantas gotas de tamaño k no le ocurre ni a), ni b).

con esta información se construyen cuatro matrices de interacción, que determinarán el estado hidrodinámico del sistema. Definimos matrices AA, BB y AB para alojar la información de los incisos a), b) y c), respectivamente. Hacemos notar que la información del inciso d) se puede obtener por diferencia entre la matríz de número N[x,k] y las tres últimas, que acabamos de definir.

Este conjunto de matrices, nos permite calcular el número de gotas de tamaño k en cualquiera de las celdas al tiempo t+dt de la manera siguiente:

$$N[x,k]_{t+dt} = N[x,k]_t - AA[x,k] - AB[x,k] - BB[x,k] + \\ + AA[x,k+1] + AB[x-1,k+1] + BB[x-1,k] \qquad (2.25)$$

La transferencia de vapor de las gotas de tamaño k en la celda x puede calcularse como sigue:

$$\dot{M}_{x,k} = 4\pi\rho_L N[x,k]_t \hat{R}_k^2 \dot{R}_k \qquad (2.26)$$

donde $\dot{M}_{x,k}$ es la fuente de masa para la fase gaseosa. Existen también fuentes de momento y de energía, que pueden

calcularse mediante las ecuaciones de arrastre presentadas en las secciones anteriores. En este tratamiento, calculamos las fuentes de momento de manera directa, esto es, tomando el momento inicial al tiempo t y restándole el momento final después de transcurrido dt. Para la energía cinética hacemos algo parecido.

2.8 Cálculos y Resultados de la Simulación

Para la aplicación de nuestro paquete de cómputo escogimos al n-Heptano como combustible. En el apéndice A hacemos algunos cálculos para la fuerza de arrastre y para la rapidez de evaporación a partir de las fórmulas que damos en las dos primeras secciones de este capítulo. A continuación presentamos los parametros utilizados en esta prueba, en donde solo estamos interesados por la evaporación del spray.

Gotas del Spray (n-Heptano)	Flujo de gases (Mezcla N_2,CO_2)
Radio Máximo = 0.0325 CM	Velocidad Promedio = 300 CM/SEG
Radio Mínimo = 0.0025 CM	Viscosidad = 0.0002 GR $CM^{-1}SEG^{-1}$
Vel. Máxima = 350 CM/SEG	Densidad = 0.0015 GR/CC
Vel. Mínima = 250 CM/SEG	Temperatura = 1000-1200 K
Densidad = 0.62 GR/CC	Con.Term.=5E-4 CAL $CM^{-1}SEG^{-1}K^{-1}$
Temp. Ebull. = 372 K	Cap. Calor. = 0.58 CAL $GR^{-1}K^{-1}$
Calor Latente = 380 CAL/GR	

De acuerdo con estos datos podemos hacer una estimación del alcance del spray, calculando primeramente el tiempo de vida de la gota más grande y posteriormente calculando la distancia recorrida durante ese tiempo por la gota más rápida. Para un caso de evaporación en ausencia de combustión, esto es, haciendo H=0 en (2.3), nos permite calcular $\lambda = 0.0020\ CM^2/SEG$ para una temperatura de 500 K en los gases y $\lambda = 0.0075\ CM^2/SEG$ para 1000 K. El tiempo de vida de una gota de 0.0325 CM es de 2 SEG para el primer caso y de 0.5 SEG para el segundo. Para los casos típicos en donde

además ocurre la combustión $\lambda \cong 0.0100$ CM^2/SEG y los tiempos de vida se reducen a 0.40 SEG aproximadamente. En nuestro experimento de prueba, tomamos estos últimos parametros y consideramos λ constante.

Siguiendo los pasos lógicos señalados en la sección 2.5, nuestro programa (SAtom 1.4) genera un spray con 12052 gotas, en el estado pseudo-estacionario, el alcance que resulta es de 113 CM. En las gráficas que siguen se presenta un análisis de las distribuciones de tamaño y velocidad de las gotas contenidas en distintos elementos de longitud y a diferentes tiempos. Las cuatro primeras, mustran las distribuciones de radios, velocidades, cuadrados de la velocidad para el spray del n-heptano, donde el tiempo transcurrido desde el inicio de la simulación es de 0.250 SEG, hay 11742 gotas y el alcance es 83.54 CM. El seguimiento de la simulación ha mostrado que para ese tiempo, el spray aún no ha llegado a su estado pseudo-estacionario. En las gráficas estamos viendo el sistema a ese tiempo y en cortes que corresponden a cuatro celdas diferentes en el spray. El primer conjunto nos representa la situación en la celda situada en el intervalo X: 0.00 - 1.00 CM, el segundo conjunto está en la celda situada en X: 10.0 - 11.0 CM., el tercero en X: 40.0 - 41.0 y el cuarto en X: 60.0 - 63.0 CM. Para cada caso se han calculado las cantidades de mayor interes para la estadistica del problema, como son, la masa total, el momento promedio, la energia cinética promedio, radio promedio de las gotas, etc., asi como las fuentes de masa (FM), de momento (FUE.MOM) y de energia cinética (FEC).

El segundo conjunto de gráficas, esta tomado a un tiempo de simulación de 0.348 seg donde ya se ha llegado al estado pseudo-estacionario con 12052 gotas en el spray. los cortes también están hechos en las mismas celdas que en el conjunto anterior, de manera que las gráficas 1a y 1b representan a la misma celda en dos tiempos diferentes y asi sucesivamente.

El tercer conjunto de gráficas corresponde a un tiempo de simulación "grande" y por supuesto en el estado

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.250 SEG PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.581 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 2.707 GR

MOMENTO 811.537 GR.CM/S

E.C. 122237.88 G(CM/S)2

PROM. VEL. 299.533 CM/S

PROM. RAD. 0.016 CM

PROM. V2 90149.75 (CM/S)2

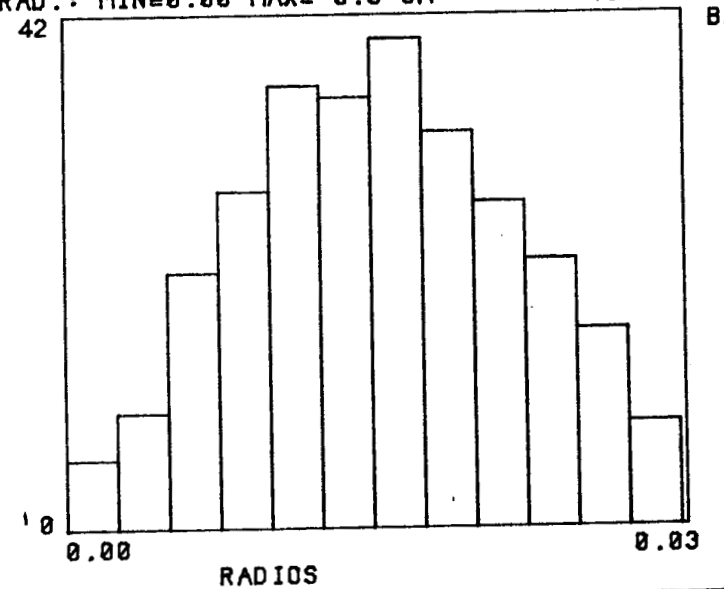
F.E.C. -26232.78 G(CM/S)2

FUE. MOM. -173.94 GR.CM/S

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=0.00 MAX=1.00CM
RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



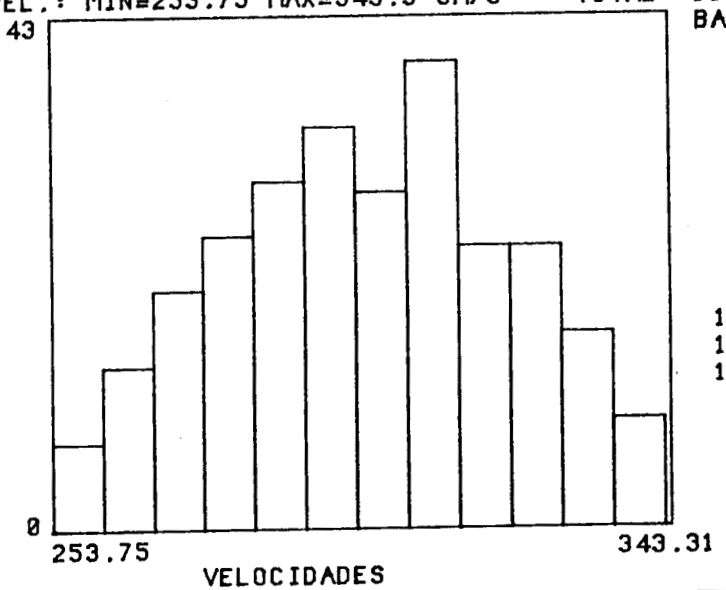
BARRA	ELEM
1	6
2	10
3	22
4	29
5	38
6	37
7	42
8	34
9	28
10	23
11	17
12	9

295 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=0.00 MAX=1.00CM
VEL.: MIN=253.75 MAX=343.3 CM/S

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



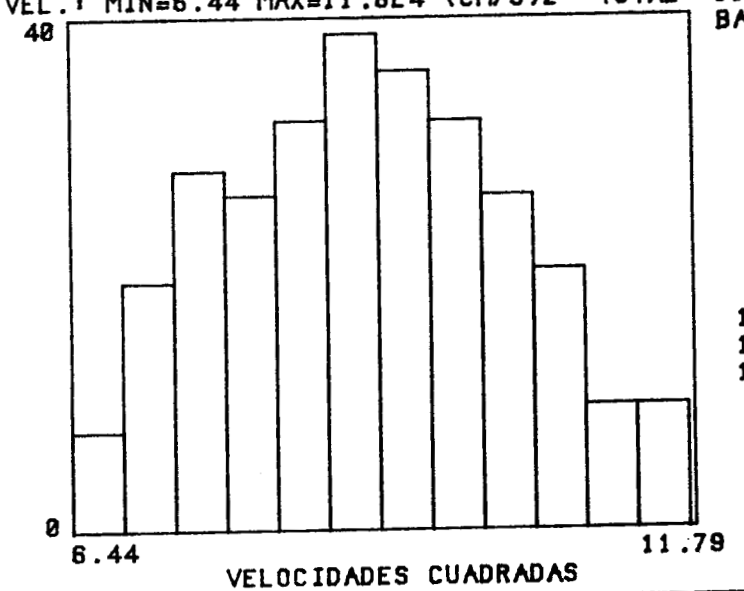
BARRA	ELEM
1	8
2	15
3	22
4	27
5	32
6	37
7	31
8	43
9	26
10	26
11	18
12	10

295 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=0.00 MAX=1.00CM
VEL.: MIN=6.44 MAX=11.8E4 (CM/S)2

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



BARRA	ELEM
1	8
2	20
3	29
4	27
5	33
6	40
7	37
8	33
9	27
10	21
11	10
12	10

295 GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.250 SEG PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.511 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 2.271 GR

MOMENTO 681.860 GR.CM/S

E.C. 102825.23 G(CM/S)2

PROM. VEL. 299.322 CM/S

PROM. RAD. 0.015 CM

PROM. V2 89968.90 (CM/S)2

F.E.C. -23062.15 G(CM/S)2

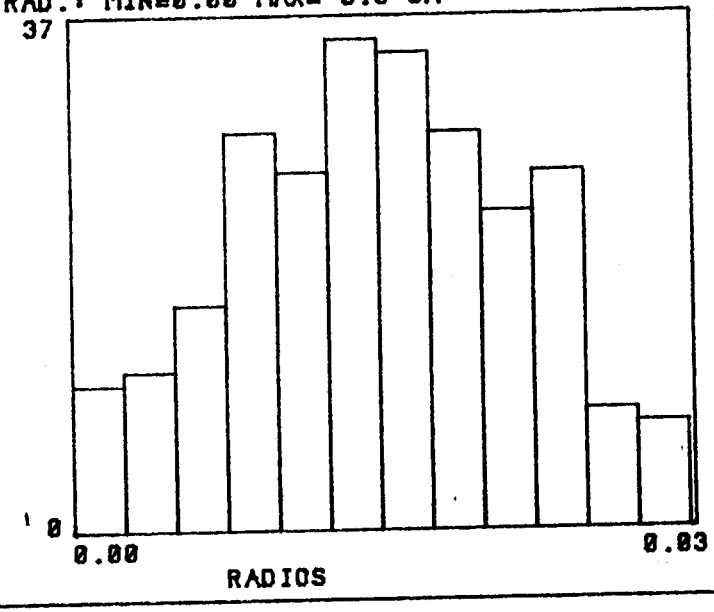
FUE. MOM. -152.99 GR.CM/S

SATOM 1.2

ADP02

X: MIN=10.00 MAX=11.00CM
RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



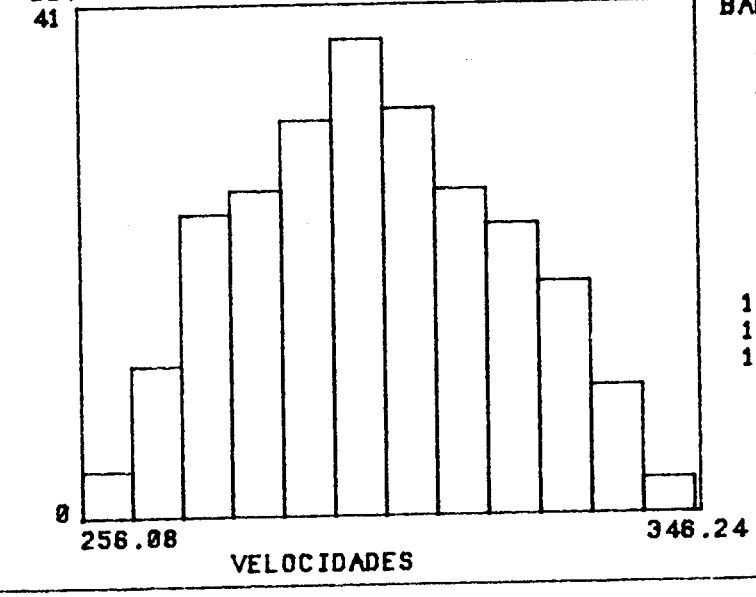
BARRA	ELEM
1	11
2	12
3	17
4	30
5	27
6	37
7	36
8	30
9	24
10	27
11	9
12	8
	268 GOTAS

SATOM 1.2

ADP02

X: MIN=10.00 MAX=11.00CM
VEL.: MIN=256.08 MAX=346.2 CM/S

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



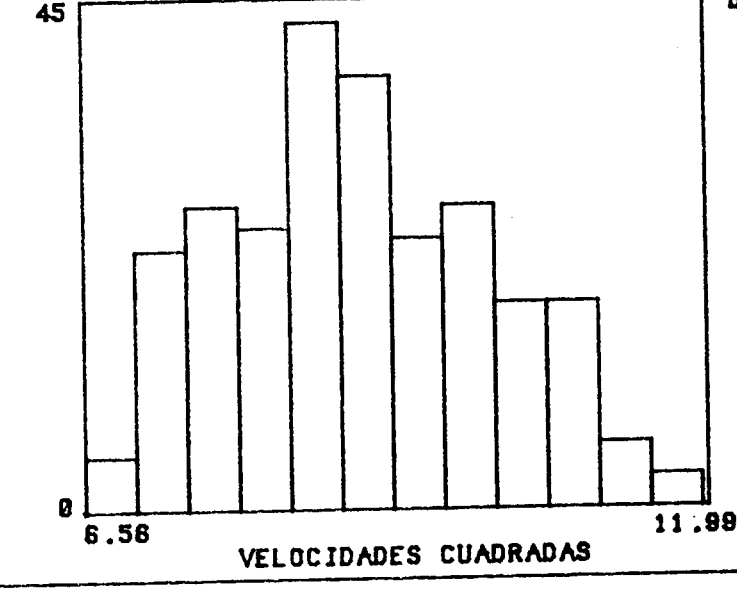
BARRA	ELEM
1	4
2	13
3	26
4	28
5	34
6	41
7	35
8	28
9	25
10	20
11	11
12	3
	268 GOTAS

SATOM 1.2

ADP02

X: MIN=10.00 MAX=11.00CM
VEL.: MIN=8.56 MAX=12.0E4 (CM/S)2

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



BARRA	ELEM
1	5
2	24
3	28
4	26
5	45
6	40
7	25
8	28
9	19
10	19
11	6
12	3
	268 GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.250 SEG PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.227 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 0.814 GR

MOMENTO 245.531 GR.CM/S

E.C. 37151.61 G(CM/S)2

PROM. VEL. 300.669 CM/S

PROM. RAD. 0.012 CM

PROM. V2 90695.49 (CM/S)2

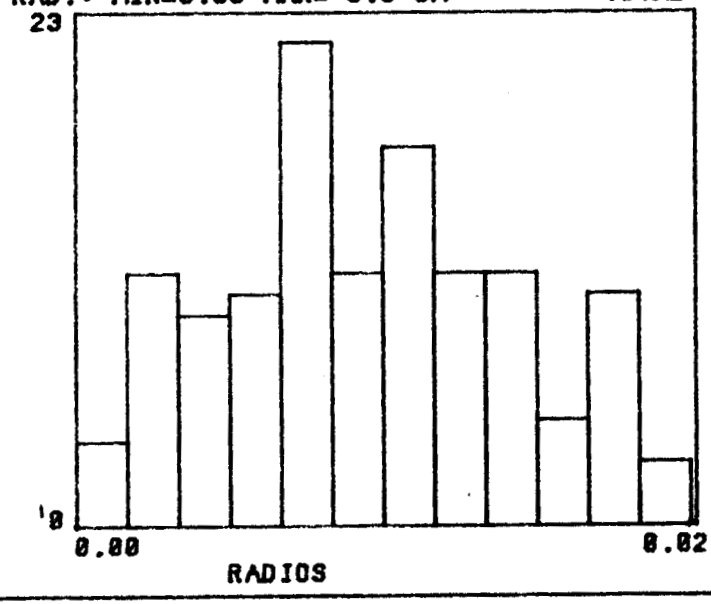
F.E.C. -10363.48 G(CM/S)2

FUE. MOM. -68.45 GR.CM/S

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=40.00 MAX=41.00CM
RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



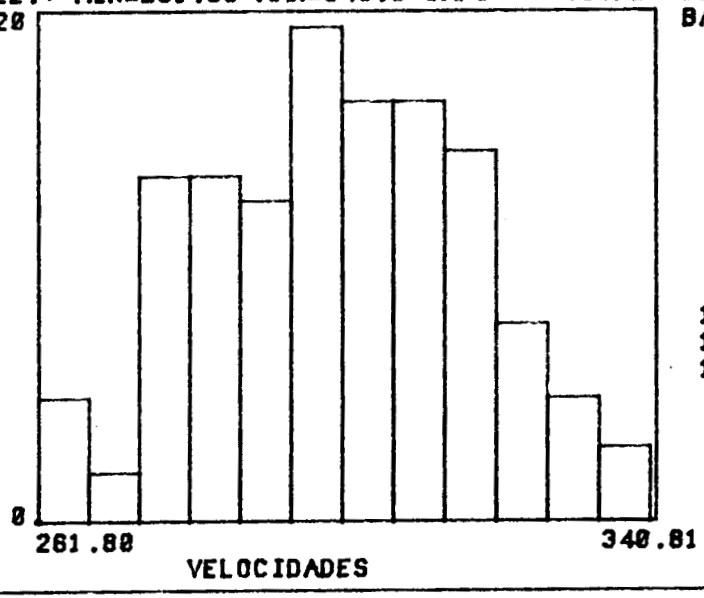
BARRA	ELEM
1	4
2	12
3	10
4	11
5	23
6	12
7	10
8	12
9	12
10	5
11	11
12	3

133 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=40.00 MAX=41.00CM
VEL.: MIN=261.80 MAX=340.8 CM/S

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



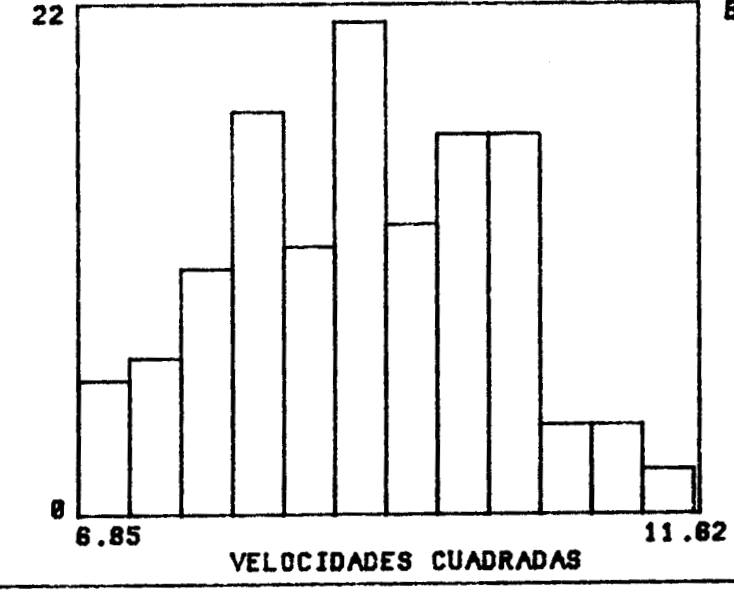
BARRA	ELEM
1	5
2	2
3	14
4	14
5	13
6	20
7	17
8	17
9	15
10	8
11	5
12	3

133 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=40.00 MAX=41.00CM
VEL.: MIN=6.85 MAX=11.6E4 (CM/S)2

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



BARRA	ELEM
1	6
2	7
3	11
4	18
5	12
6	22
7	13
8	17
9	17
10	4
11	4
12	2

133 GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.250 SEG PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.253 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 0.834 GR

MOMENTO 253.445 GR.CM/S

E.C. 38629.98 G(CM/S)2

PROM. VEL. 302.151 CM/S

PROM. RAD. 0.011 CM

PROM. V2 91553.24 (CM/S)2

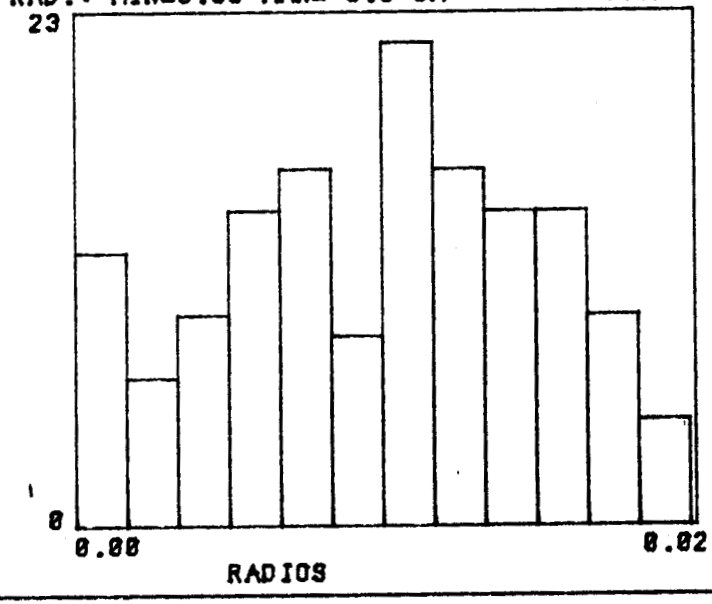
F.E.C. -11718.31 G(CM/S)2

FUE. MOM. -76.91 GR.CM/S

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=60.00 MAX=63.00CM
RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



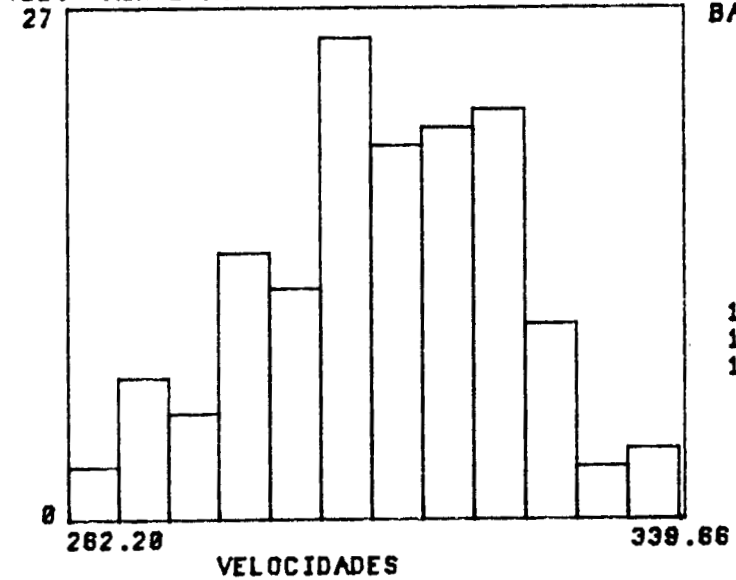
BARRA	ELEM
1	13
2	7
3	10
4	15
5	17
6	9
7	23
8	17
9	15
10	15
11	10
12	5

156 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=60.00 MAX=63.00CM
VEL.: MIN=262.20 MAX=339.7 CM/S

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



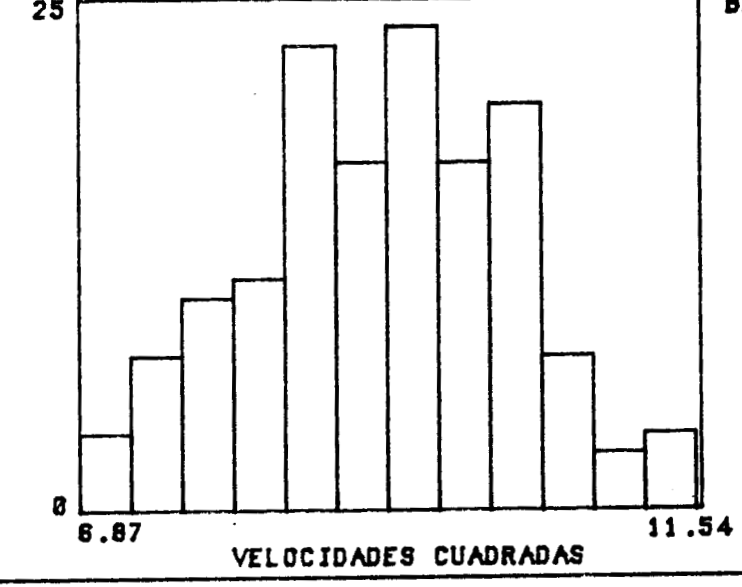
BARRA	ELEM
1	3
2	8
3	8
4	15
5	13
6	27
7	21
8	22
9	23
10	11
11	3
12	4

156 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=60.00 MAX=63.00CM
VEL.: MIN=6.87 MAX=11.5E4 (CM/S)2

ALCANCE: 83.54CM
TOTAL 11742 GOTAS



BARRA	ELEM
1	4
2	8
3	11
4	12
5	24
6	18
7	25
8	18
9	21
10	8
11	3
12	4

156 GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.348 SEG

PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.578 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 2.690 GR

MOMENTO 805.520 GR.CM/S

E.C. 121188.46 G(CM/S)2

PROM. VEL. 299.382 CM/S

PROM. RAD. 0.016 CM

PROM. V2 90018.38 (CM/S)2

F.E.C. -26876.47 G(CM/S)2

FUE. MOM. -173.02 GR.CM/S

SATOM 1.2

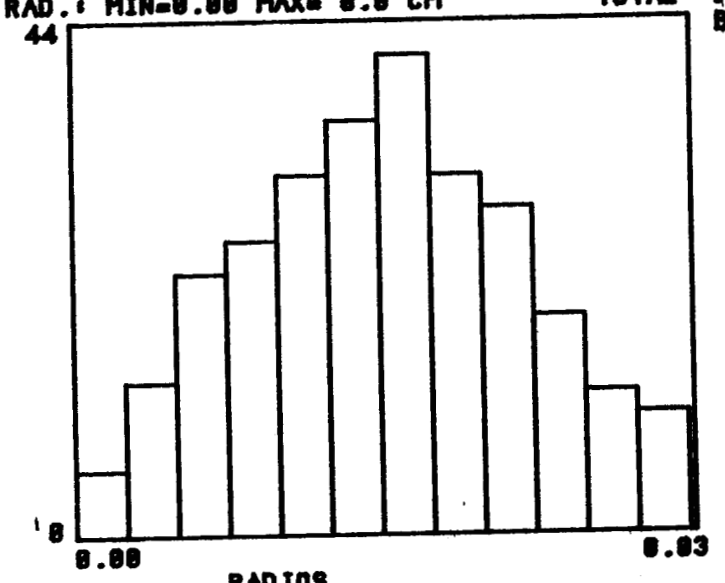
ADP02

X: MIN=0.00 MAX=1.00CM

RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12852 GOTAS



BARRA	ELEM
1	6
2	14
3	24
4	27
5	33
6	38
7	44
8	33
9	30
10	20
11	13
12	11

293 GOTAS

SATOM 1.2

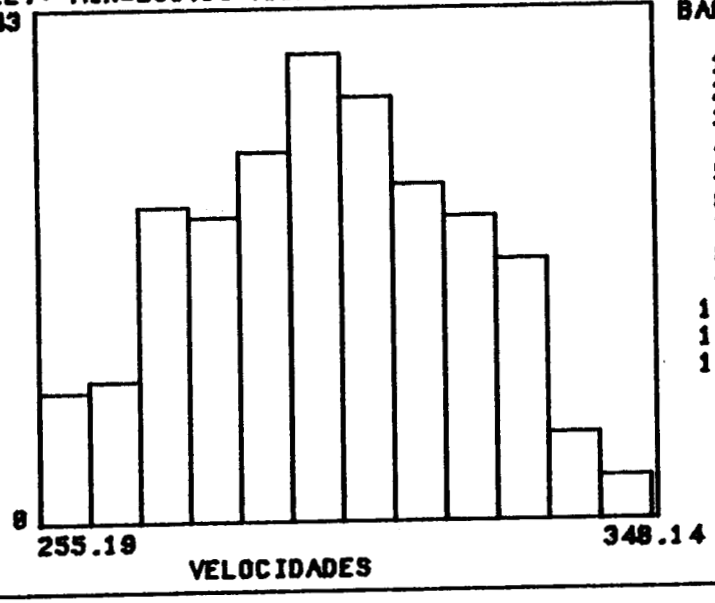
ADP02

X: MIN=0.00 MAX=1.00CM

VEL.: MIN=255.19 MAX=348.1 CM/S

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12852 GOTAS



BARRA	ELEM
1	12
2	13
3	29
4	28
5	34
6	43
7	39
8	31
9	28
10	24
11	8
12	4

293 GOTAS

SATOM 1.2

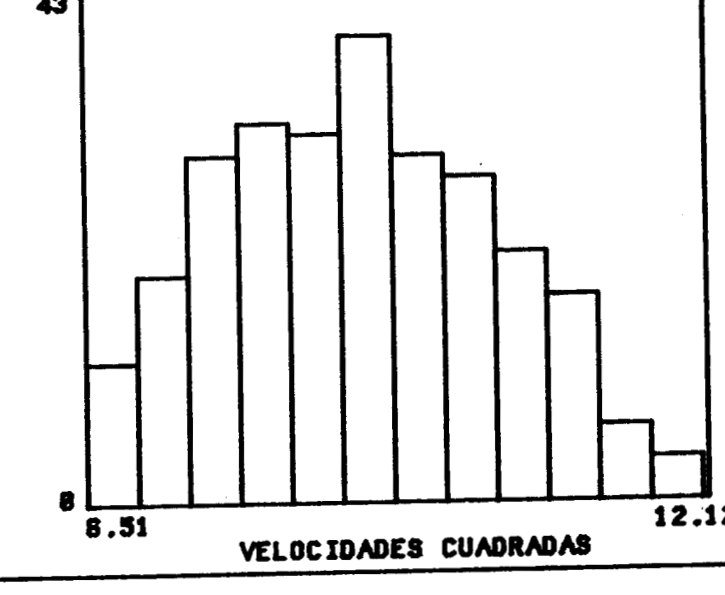
ADP02

X: MIN=0.00 MAX=1.00CM

VEL.: MIN=0.51 MAX=12.1E4 (CM/S)2

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12852 GOTAS



BARRA	ELEM
1	13
2	21
3	32
4	35
5	34
6	43
7	32
8	30
9	23
10	19
11	7
12	4

293 GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.348 SEG

PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.536 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 2.362 GR

MOMENTO 705.958 GR.CM/S

E.C. 105952.34 G(CM/S)2

PROM. VEL. 299.435 CM/S

PROM. RAD. 0.015 CM

PROM. V2 90015.27 (CM/S)2

F.E.C. -24118.36 G(CM/S)2

FUE. MOM. -160.35 GR.CM/S

SATOM 1.2

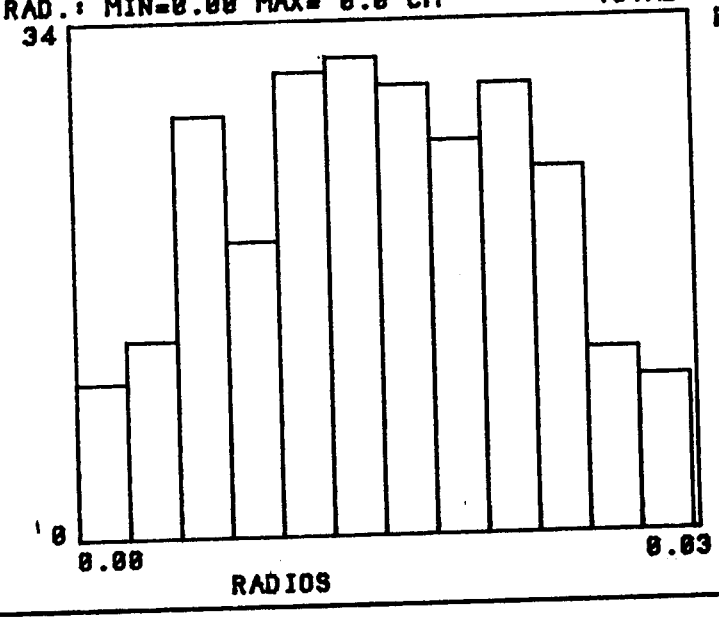
ADP02

X: MIN=10.00 MAX=11.00CM

RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12052 GOTAS



BARRA	ELEM
1	11
2	14
3	30
4	21
5	33
6	34
7	32
8	28
9	32
10	26
11	13
12	11

285 GOTAS

SATOM 1.2

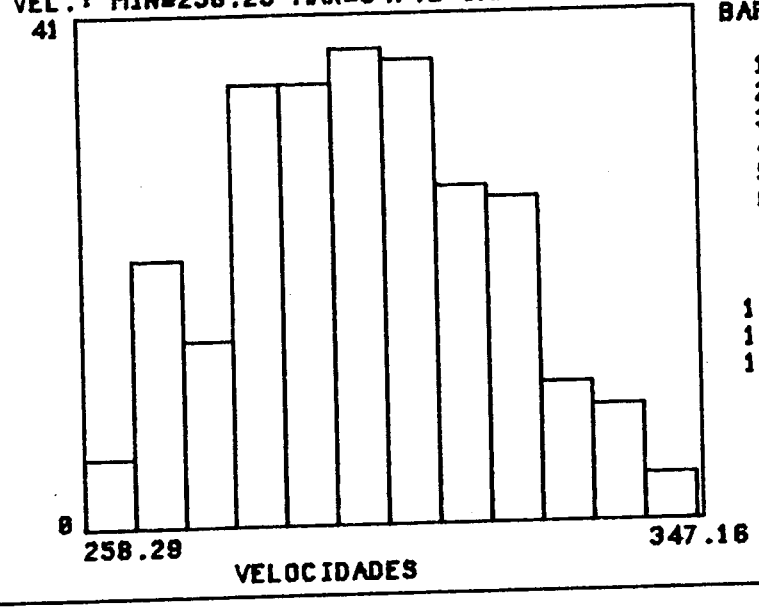
ADP02

X: MIN=10.00 MAX=11.00CM

VEL.: MIN=258.29 MAX=347.2 CM/S

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12052 GOTAS



BARRA	ELEM
1	6
2	23
3	16
4	38
5	38
6	41
7	40
8	29
9	28
10	12
11	10
12	4

285 GOTAS

SATOM 1.2

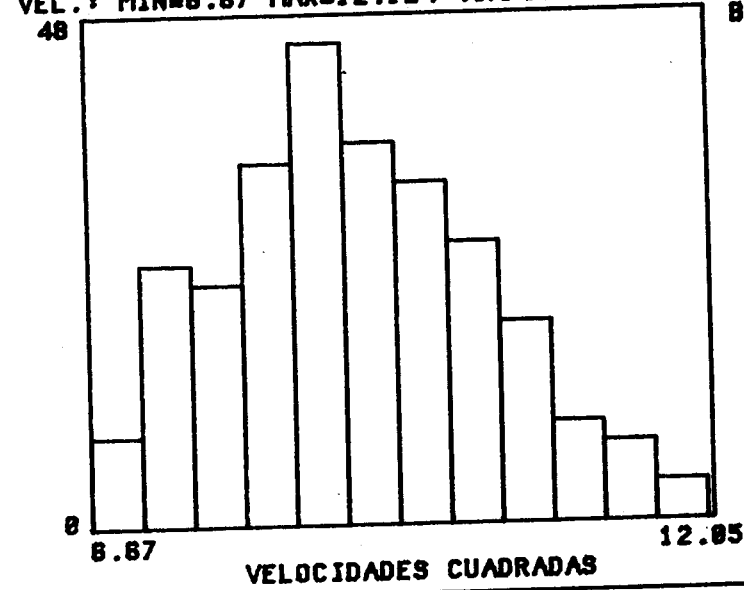
ADP02

X: MIN=10.00 MAX=11.00CM

VEL.: MIN=8.67 MAX=12.1E4 (CM/S)2

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12052 GOTAS



BARRA	ELEM
1	9
2	26
3	24
4	36
5	48
6	38
7	34
8	28
9	28
10	10
11	8
12	4

285 GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.348 SEG PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.142 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 0.475 GR

MOMENTO 144.351 GR.CM/S

E.C. 21985.13 G(CM/S)2

PROM. VEL. 302.364 CM/S

PROM. RAD. 0.012 CM

PROM. V2 91618.00 (CM/S)2

F.E.C. -6551.15 G(CM/S)2

FUE. MOM. -43.02 GR.CM/S

SATOM 1.2

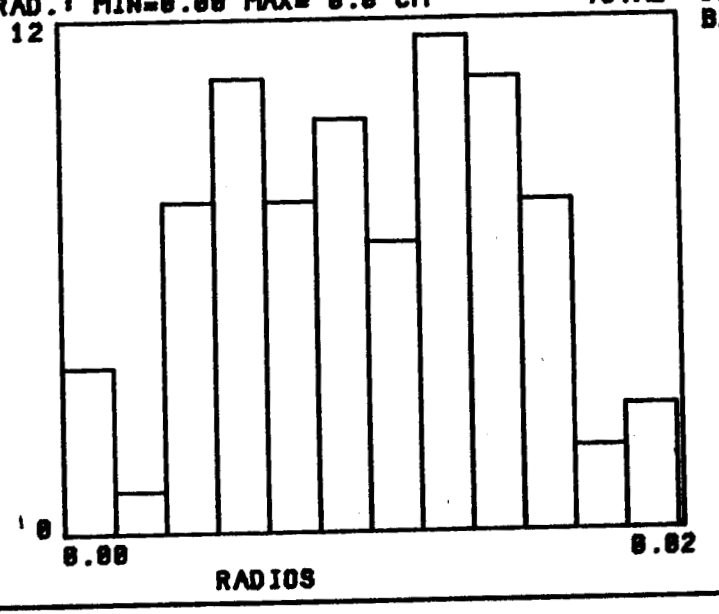
ADP02

X: MIN=50.00 MAX=51.00CM

RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12852 GOTAS



BARRA	ELEM
1	4
2	1
3	8
4	11
5	8
6	10
7	7
8	12
9	11
10	8
11	2
12	3
	85
	GOTAS

SATOM 1.2

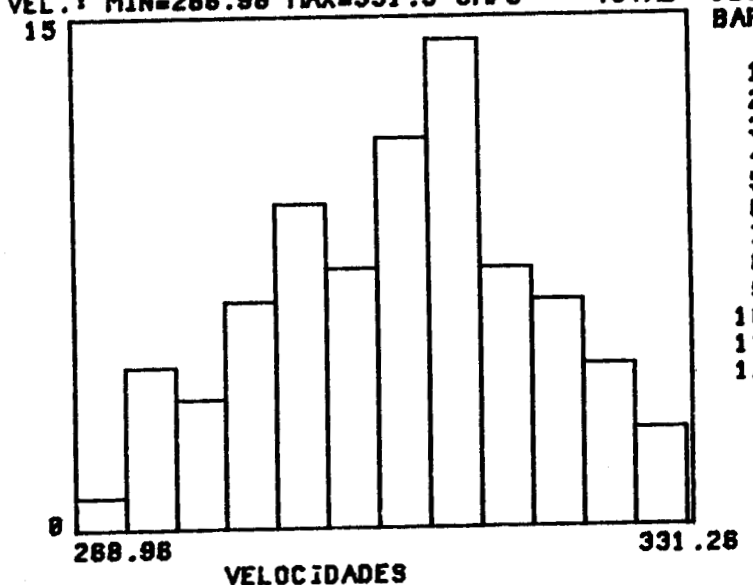
ADP02

X: MIN=50.00 MAX=51.00CM

VEL.: MIN=288.96 MAX=331.3 CM/S

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12852 GOTAS



BARRA	ELEM
1	1
2	5
3	4
4	7
5	10
6	8
7	12
8	15
9	8
10	7
11	5
12	3
	85
	GOTAS

SATOM 1.2

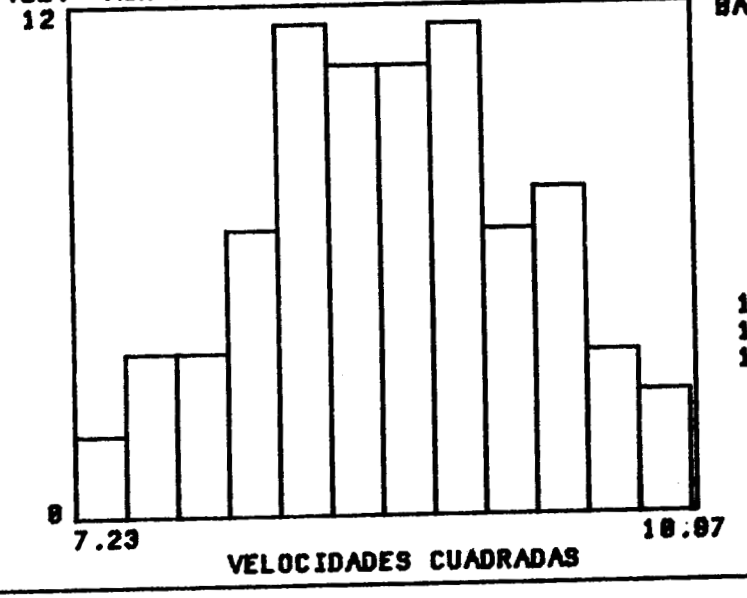
ADP02

X: MIN=50.00 MAX=51.00CM

VEL.: MIN=7.23 MAX=11.8E4 (CM/S)2

ALCANCE: 113.34CM

TOTAL 12852 GOTAS



BARRA	ELEM
1	2
2	4
3	4
4	7
5	12
6	11
7	11
8	12
9	7
10	8
11	4
12	3
	85
	GOTAS

DATOS DE LA CELDA

TIEMPO SIM. 0.348 SEG PERIODO 0.001 SEG

GASES

VEL. PROM. 300.00 CM/S

TEMPERATURA 1200 C

N2 77% MOL

CO2 12% MOL

H2O 10% MOL

CO NO PRESENTE

F. M. 0.291 GR/S

GOTAS

MASA TOTAL 0.912 GR

MOMENTO 276.791 GR.CM/S

E.C. 42112.04 G(CM/S)2

PROM. VEL. 302.616 CM/S

PROM. RAD. 0.011 CM

PROM. V2 91754.85 (CM/S)2

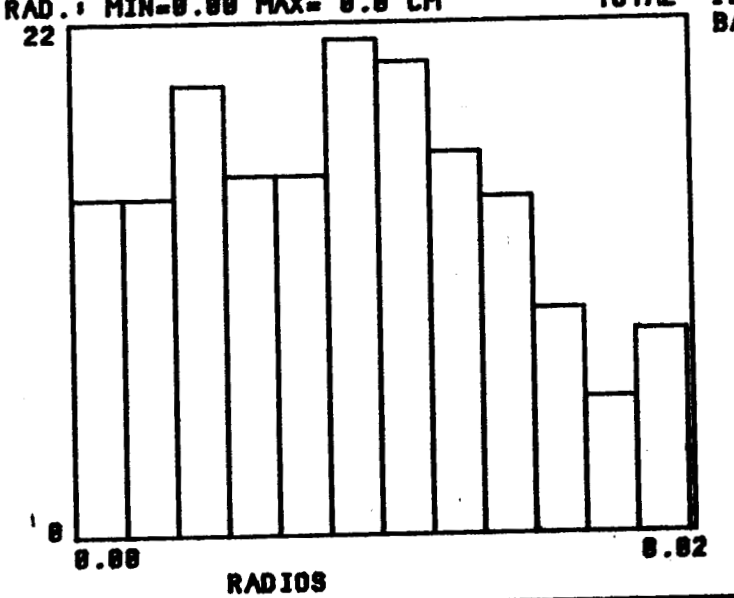
F.E.C. -13437.38 G(CM/S)2

FUE. MOM. -88.24 GR.CM/S

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=00.00 MAX=03.00CM
RAD.: MIN=0.00 MAX= 0.0 CM

ALCANCE: 113.34CM
TOTAL 12052 GOTAS

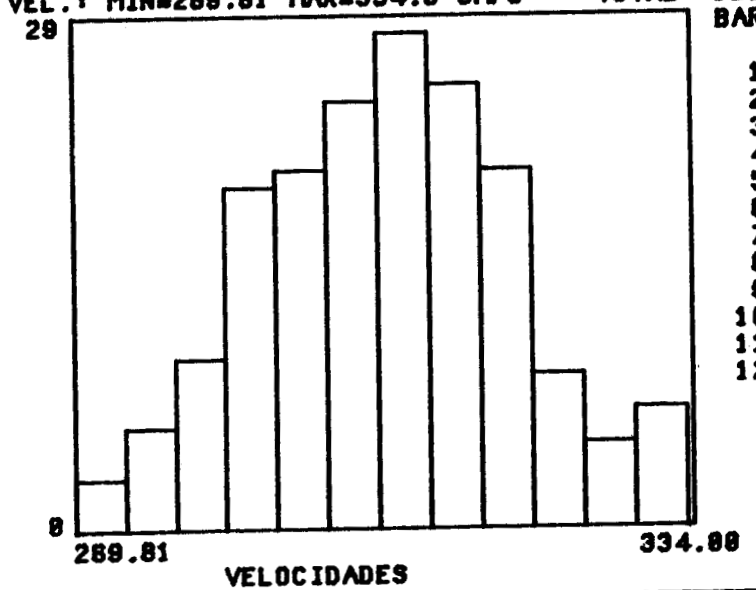


BARRA	ELEM
1	15
2	15
3	20
4	18
5	18
6	22
7	21
8	17
9	15
10	10
11	6
12	9
	182 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=00.00 MAX=03.00CM
VEL.: MIN=269.01 MAX=334.0 CM/S

ALCANCE: 113.34CM
TOTAL 12052 GOTAS

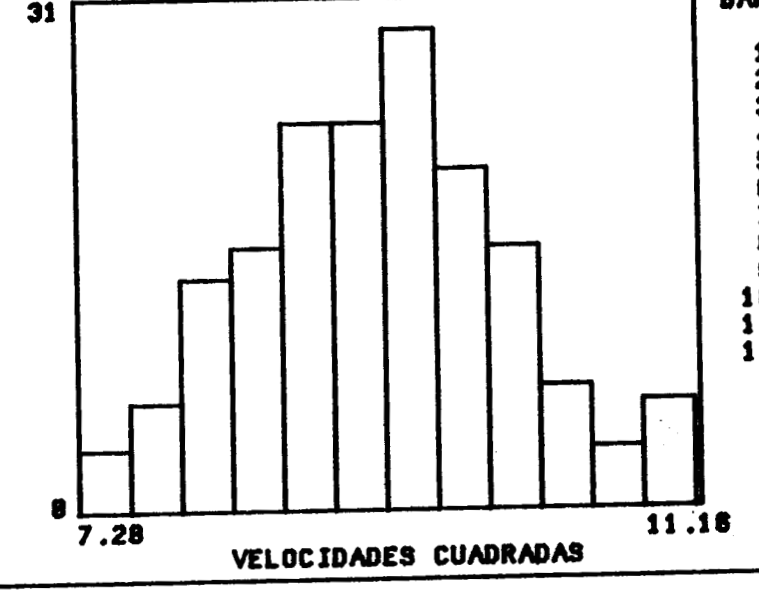


BARRA	ELEM
1	3
2	6
3	10
4	20
5	21
6	25
7	29
8	26
9	21
10	9
11	5
12	7
	182 GOTAS

SATOM 1.2 ADP02

X: MIN=00.00 MAX=03.00CM
VEL.: MIN=7.28 MAX=11.2E4 (CM/S)2

ALCANCE: 113.34CM
TOTAL 12052 GOTAS



BARRA	ELEM
1	4
2	7
3	15
4	17
5	25
6	25
7	31
8	22
9	17
10	8
11	4
12	7
	182 GOTAS

93126

pseudo-estacionario, en donde se aprecia que en las celdas que estamos analizando, la situación no ha cambiado apreciablemente.

Interpretamos ahora estos resultados desde el punto de vista estadístico:

Los histogramas de radios y velocidades principalmente, nos dicen cúal es el número de gotas que al tiempo t y en el elemento de volumen $\vec{x} \pm \Delta\vec{x}$, tienen un radios $R \pm \Delta R$, con velocidades $\vec{v} \pm \Delta\vec{v}$. Esto es justamente la descripción de la función de distribución asociada a las gotas, dicha función al igual que su ecuación de evolución serán discutidas en el capítulo quinto (Varela,1989); aquí nos limitamos a señalar que el programa simulador ha permitido su cálculo numérico, tomando como base un modelo de interacción gotas-gases en el que la influencia de los gases sobre las gotas ocurre a través de una fuerza de arrastre tipo Stokes y la evaporación está dada por la ley del diámetro cuadrado rectilineo.

Otro ejemplo que hemos trabajado con este programa simulador corresponde al caso particular en que atomizamos gotas de tamaño característico $\hat{R}_{12}$ unicamente. Generamos el spray y obtenemos las matrices de interacción después de haber atomizado 200 paquetes de gotas. Analizando el arreglo N[50,12] que contiene la información acerca del número de gotas en cada celda $\hat{C}x$ y para cada tamaño $\hat{R}_k$ obtenemos la figura 2. De esta gráfica podemos extraer las características generales de ese spray: i) el alcance es aproximadamente de un metro, ii) las gotas de un tamaño $\hat{R}_k$ se concentran alrededor de una cierta posición y iii) existen traslapes entre diferentes grupos, dicho traslape aumenta en posiciones alejadas del atomizador. Es importante notar que la existencia de grupos de tamaños menores es consecuencia de la evaporación de las gotas de tamaño $\hat{R}_{12}$; la posición en la que se encuentran depende de la velocidad, de la rapidez de evaporación y de la fuerza de arrastre.

Viendo las cosas de esta manera, es claro que la en la figura 2, las curvas que representan a los diversos

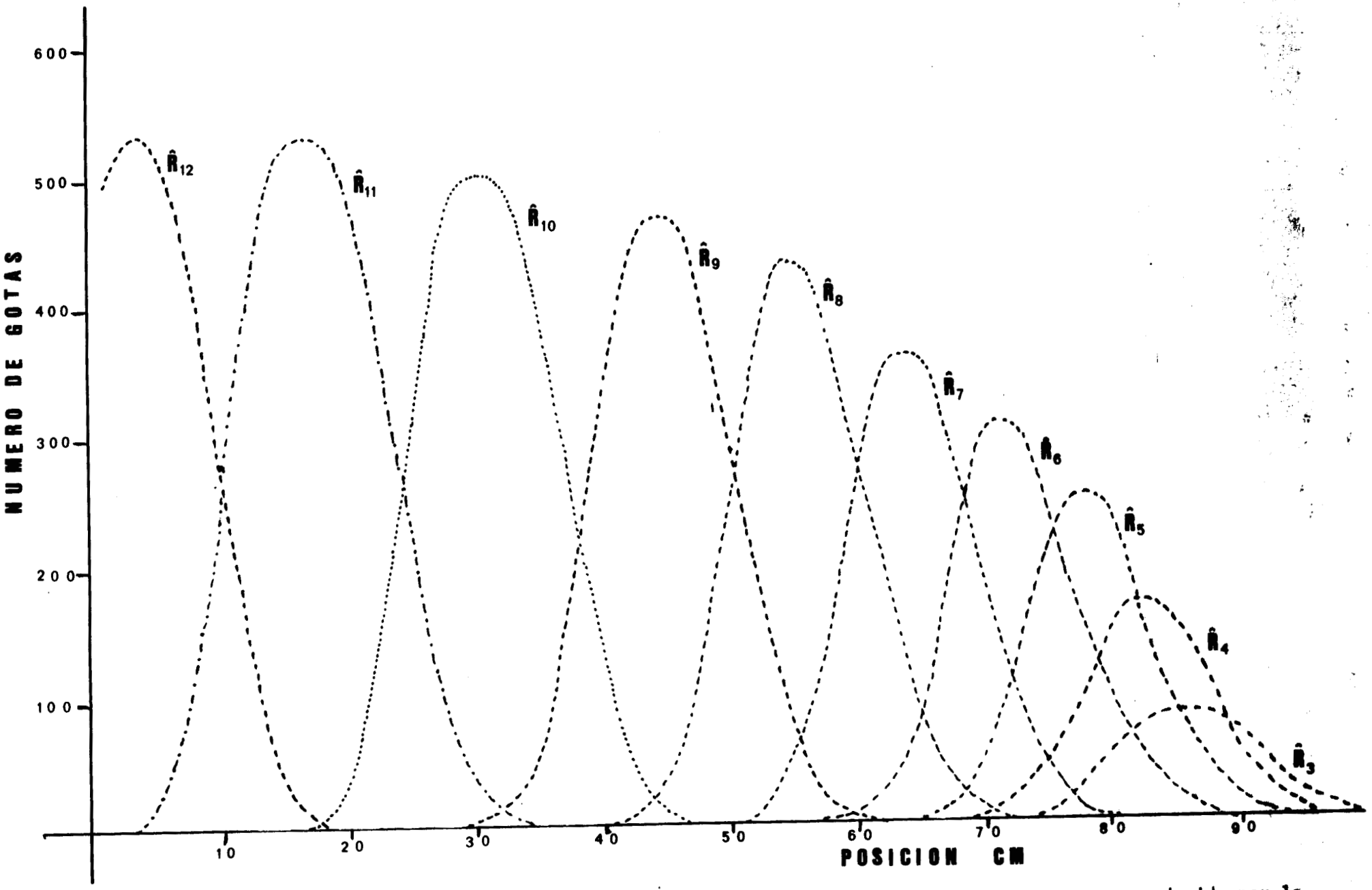


Figura 2.2. Distribución de gotas agrupadas por tamaños a lo largo de un spray producido por la atomización de gotas de tamaño característico R_{12}.

sectores $\hat{R}_k$ son de hecho, funciones de distribución de tamaños a lo largo del spray.

Por otra parte y como ya hemos hecho notar en la sección 2.7, el programa simulador también permite calcular las fuentes de masa, momento y energía, mostrado en las figuras, así como las matrices de propiedades que nos dan la información contenida en cada celda y permiten calcular los cambios en las propiedades respecto al tiempo y a la posición al tomar celdas contiguas.

Este programa de hecho está resolviendo numéricamente el problema hidrodinámico pseudo-estacionario que plantearemos en el capítulo cuarto (Varela,1989); proveyéndonos de las fuentes correspondientes y de los términos que intervienen en las ecuaciones de balance.

Sobra decir que ese mismo programa, puede emplearse con otros modelos de interacción gotas-gases, por ejemplo con aquellos que sean el resultado del tratamiento cinético del capítulo quinto, pero evidentemente este es un trabajo para el futuro.

CAPITULO TERCERO

CINETICA DE COMBUSTION

En este capítulo, nos ocupamos de los cambios en la composición que sufre el flujo reactivo asociado a un spray en su proceso de combustión. Como lo señalamos anteriormente, la evaporación de las gotas arrastradas por el flujo, sirven como alimentación de combustible, permitiendo, sosteniendo y en cierta manera, controlando el proceso de combustión.

Para describir este proceso, detenemos el tiempo, imaginando que en un instante dado, podemos tomar una fotografía del spray y su entorno, y que podemos obtener de ésta, información hidrodinámica del sistema. Observaremos que en posiciones cercanas al origen (upstream), la composición de los gases es prácticamente la del aire (79%N_2 y 21%O_2), mientras que al final (downstream), la composición es aproximadamente: 75%N_2 y 25% de productos de combustión. En términos cualitativos y globales, podemos decir que la composición de los gases cambia a lo largo del spray, y que la masa gaseosa esta constituida prácticamente por nitrógeno. Es bien conocido que en las condiciones de nuestro problema, el nitrógeno no reacciona y por tanto, la cantidad que entra al sistema es la misma que sale por la chimenea. En términos generales, podemos pensar que el flujo reactivo que nos ocupa, es una masa de nitrógeno en cuyo seno reaccionan combustibles y oxidantes.

Observaremos también, que mientras el oxígeno disminuye, los productos de combustión (CO, CO_2, H_2O, NO,

etc) aumentan conforme nos alejamos del origen. Esto se explica facilmente, en base a la oxidación que ocurre a lo largo del spray. La información más importante que podemos obtener de esa fotografía, es la cantidad de combustible presente, que cualitativamente, nos indica la intensidad de la evaporación de las gotas.

La intensidad de la evaporación de las gotas $\dot{M}(\vec{x},t)$, es una cantidad que depende principalmente de la cantidad de gotas presentes en $(\vec{x},t)$ y de su distribución de tamaños. En este capítulo, damos por conocida esa información hidrodinámica y enfocamos nuestra atención a los procesos químicos que ocurren entre dos fotografías, tomadas con un intervalo de 10^{-3} seg.

Escogimos periodos de milisegundos, debido a que coinciden con los tiempos propios de atomización y de los procesos hidrodinámicos en los que estamos interesados. Cabe señalar, que estos intervalos de tiempo son tres ordenes de magnitud más grandes, que aquellos involucrados en las reacciones químicas de combustión, mismos que son del orden de 10^{-6}segundos.

3.1 Cinética de Combustión de Hidrocarburos

Los mecanismos cinéticos para la combustión de hidrocarburos involucran gran cantidad de reacciones de rompimiento y oxidación de moléculas. La cantidad de reacciones depende de la complejidad y del tamaño de la molécula del hidrocarburo en cuestión. Por ejemplo, para metano se requieren 63 reacciones (Coffee,1984), el propano requiere 128 (Jachimowski,1984), para el n-pentano 326 (Westbrook,1988) y así podríamos llegar al n-heptano para el cual, la cantidad de reacciones se vuelve prácticamente inmanejable.

Es obvio que la cantidad de reacciones representa un obstaculo a vencer. Esta problemática esta

siendo atacada en la actualidad mediante esquemas globales de reacción (Jones,1988), que simplifican los cálculos y reducen enormemente el tiempo de computación. Estas ideas no son nuevas, pero han vuelto a surgir ante la imposibilidad y lo impráctico de resolver sistemas de cientos de reacciones. Por ejemplo, Jones estudia la combustión de alkanos, mediante un mecanismo global de solo cuatros pasos:

$$[1]. \quad C_nH_{2n+2} + \frac{n}{2}O_2 \longrightarrow nCO + (n+1)H_2 \qquad (3.1)$$

$$[2]. \quad C_nH_{2n+2} + nH_2O \longrightarrow nCO + (2n+1)H_2 \qquad (3.2)$$

$$[3]. \quad H_2 + \frac{1}{2}O_2 \longleftrightarrow H_2O \qquad (3.3)$$

$$[4]. \quad CO + H_2O \longleftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad (3.4)$$

en donde los números encerrados en paréntesis cuadrados indican el orden en que dichas reacciones se toman en cuenta y las flechas denotan la dirección de la reacción, notando que las dos últimas son reacciones reversibles. Las velocidades de reacción para este mecanismo fueron determinadas en base a la comparación con datos experimentales sobre la combustión de metano, etano, propano y n-butano, y vienen dadas el artículo de Jones(1988). Estos resultados aún no han sido validados para alkanos mayores como lo son: el n-heptano, n-octano etc.

Nosotros también retomamos la idea de los esquemas globales, pero la aplicamos de una manera diferente. Consideramos una combustión incompleta, en donde las moléculas de hidrocarburo se rompen y solo llegan a monóxido de carbono y radicales hidroxilos en su mayor parte; es claro que si los compuestos contienen además, moléculas de nitrógeno, azufre, etc., éstas también aparecerán en la mezcla. A manmera de ejemplo damos aqui la cinética de rompimiento de alkanos, en la cual nos basamos para después manejar la cinética de oxidación.

La cinética de rompimiento para un alkano típico, puede expresarse con un solo paso de reacción:

[5] $$C_nH_{2n+2} + \left(\frac{3n+2}{2}\right)O_2 \rightarrow nCO + (2n+2)OH \qquad (3.5)$$

cualquier otro compuesto que esté presente en la mezcla de combustible presentará una cinética semejante, de manera que el resultado promedio de estos mecanismos nos proveé de una mezcla de monóxido de carbono, radicales hidroxilo, óxidos de nitrógeno, óxidos de azufre, etc..

Para los propósitos de nuestro cálculo hemos de suponer que la velocidad de las reacciones de rompimiento, es mucho mayor que las correspondientes a la cinética de oxidación. Esto nos lleva a que al iniciar el estudio de la cinética de oxidación se tengan en la mezcla unicamente los reactantes propios de dicha cinética, que a su vez son los productos de la cinética de rompimiento especificada antes. Esto lo hacemos debido a que en este trabajo no estamos interesados en los detalles de la cinética de rompimiento.

3.2 Cinética básica de oxidación

En la literatura no hay un acuerdo definitivo acerca del número y caracteristiscas del conjunto de reacciones que conforman una cinética de combustión; en realidad es el problema que se esté abordando o la experiencia del investigador, la que en muchos casos determina el paquete a usar y serán los resultados y su acuerdo con el experimento los que determinan si la cinética escogida es razonable. Visto el problema en este contexto, es claro que podemos escoger diferentes grupos de reacciones y lo que más nos interesa es tener un método versátil y de utilización adecuada para diversos paquetes; sin que en este momento sea de mucha importancia cual de ellos se escoge para

generar las rutinas de cómputo básicas.

Aquí implementamos un esquema reactivo cuyos compuestos básicos son el oxígeno del aire O_2, el monóxido de carbono CO, el radical hidroxilo OH, el monóxido de nitrógeno NO y el dióxido de azufre SO_2; que son los compuestos resultantes de la cinética de rompimiento que mencionamos en la sección anterior. A su vez, supondremos que la mezcla reactiva estará compuesta de los elementos mencionados y de una gran masa de nitrógeno proveniente del aire, este nitrógeno molecular N_2 interviene de manera completamente secundaria y se considerará como el agente en el cual ocurren las reacciones, es decir, será el "tercer cuerpo", mismo que aparece señalado como M en el conjunto de reacciones químicas que se consideran.

El paquete básico que se pretende estudiar consta de 33 reacciones químicas, que son las reacciones mejor estudiadas para los compuestos que hemos señalado antes y de las cuales se seleccionarán aquellas que mejor se adapten a un problema en particular.

R.1	O	+	O	+	M	$\longleftrightarrow$	O_2	+	M
R.2	O	+	H	+	M	$\longleftrightarrow$	OH	+	M
R.3	H	+	H	+	M	$\longleftrightarrow$	H_2	+	M
R.4	N	+	N	+	M	$\longleftrightarrow$	N_2	+	M
R.5			H	+	O_2	$\longleftrightarrow$	OH	+	O
R.6			O	+	H_2	$\longleftrightarrow$	OH	+	H
R.7			O	+	N_2	$\longleftrightarrow$	NO	+	N
R.8			N	+	O_2	$\longleftrightarrow$	NO	+	O
R.9	O_2	+	H	+	M	$\longleftrightarrow$	HO_2	+	M
C.1	CO	+	O	+	M	$\longleftrightarrow$	CO_2	+	M
C.2	CO	+	H	+	M	$\longleftrightarrow$	CHO	+	M
C.3			CO	+	O_2	$\longleftrightarrow$	CO_2	+	O
C.4			CO	+	OH	$\longleftrightarrow$	CO_2	+	H
C.5			CO	+	HO_2	$\longleftrightarrow$	OH	+	CO_2

H.1	OH	+	H	+	M	$\longleftrightarrow$	H_2O	+	M
H.2			OH	+	H_2	$\longleftrightarrow$	H_2O	+	H
H.3			OH	+	OH	$\longleftrightarrow$	H_2O	+	O
H.4			HO_2	+	H	$\longleftrightarrow$	OH	+	OH
H.5			HO_2	+	H	$\longleftrightarrow$	H_2	+	O_2
H.6			HO_2	+	H_2	$\longleftrightarrow$	H_2O	+	OH
H.7			HO_2	+	O	$\longleftrightarrow$	OH	+	O_2
H.8			HO_2	+	OH	$\longleftrightarrow$	H_2O	+	O_2
H.9			HO_2	+	NO	$\longleftrightarrow$	NO_2	+	OH
H.10			OH	+	N	$\longleftrightarrow$	NO	+	H
N.1	NO	+	H	+	M	$\longleftrightarrow$	HNO	+	M
N.2			NO	+	NO	$\longleftrightarrow$	O	+	N_2O
N.3			HNO	+	H	$\longleftrightarrow$	NO	+	H_2
N.4			HNO	+	OH	$\longleftrightarrow$	NO	+	H_2O
N.5			N_2O	+	H	$\longleftrightarrow$	OH	+	N_2
N.6	NO	+	O	+	M	$\longleftrightarrow$	NO_2	+	M
S.1	SO_2	+	O	+	M	$\longleftrightarrow$	SO_3	+	M
S.2			SO_3	+	O	$\longleftrightarrow$	SO_2	+	O_2
S.3			SO_2	+	NO_2	$\longleftrightarrow$	SO_3	+	NO

En este conjunto de reacciones intervienen todos los compuestos que resultan del rompimiento de un hidrocarburo típico. Se han agrupado de acuerdo con algunas de sus características generales, por ejemplo, el primer subconjunto que está etiquetado con R.x, corresponde a reacciones donde intervienen principalmente radicales. Los otros subconjuntos etiquetados con C.x, H.x, N.x y S.x compiten por la captación de dichos radicales. Su obtención depende fuertemente de la velocidad de las reacciones y ésta a su vez de la temperatura y la concentración de las especies.

Cabe hacer notar que el nitrógeno que aparece en estas reacciones no es el proveniente del aire, sino aquel contenido en el combustible. De manera que un combustible limpio de productos nitrogenados no requiere de las

reacciones correspondientes; lo mismo puede decirse de un combustible limpio de azufre.

3.3 Representación Matricial

Para conocer los cambios en la composición en la mezcla debido a las reacciones químicas, es menester resolver el sistema de ecuaciones que resultan de aplicar la correspondiente cinética, que involucra a las velocidades de reacción y el conocimiento de las concentraciones iniciales. Como ya se dijo en la sección anterior, la solución de estos paquetes requiere versatilidad para cambiar el conjunto de reacciones que son relevantes en un problema específico. Para cálculos rutinarios, es conveniente formular un método sistemático que nos permita hacer cambios en los paquetes con el menor número de intervenciones en el programa. Para ello resulta muy adecuado el empleo de una representación matricial, como lo veremos más adelante.

Para describir este método consideremos primeramente un paquete de tres reacciones que involucran a cinco especies químicas como sigue:

$$1) \quad A + B + C \leftrightarrow D + E$$
$$2) \quad D + D \leftrightarrow A + E$$
$$3) \quad E \leftrightarrow C + D$$

en donde A, B, C, D y E, son compuestos químicos que intervienen en la reacción. El símbolo $\leftrightarrow$ representa a una reacción reversible, en donde por convención consideramos como reacción directa hacia la derecha con rapidez K^D y reversa hacia la izquierda con rapidez K^R. Los cambios en el perfil de concentraciones quedan expresados de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt}[A] = -K_1^D[A][B][C] + K_1^R[D][E] + K_2^D[D][D] - K_2^R[A][E]$$

$$\frac{d}{dt}[B] = -K_1^D[A][B][C] + K_1^R[D][E]$$

$$\frac{d}{dt}[C] = -K_1^D[A][B][C] + K_1^R[D][E] + K_3^D[E] - K_3^R[C][D]$$

$$\frac{d}{dt}[D] = K_1^D[A][B][C] - K_1^R[D][E] - K_2^D[D]^2 + K_2^R[A][E] + K_3^D[E] - K_3^R[C][D]$$

$$\frac{d}{dt}[E] = K_1^D[A][B][C] - K_1^R[D][E] + K_2^D[D]^2 - K_2^R[A][E] - K_3^D[E] + K_3^R[C][D]$$

Los paréntesis cuadrados encerrando a una sustancia indican la concentración de la misma en unidades de masa por unidad de volúmen. Esta conversión se puede sistematizar empleando una representación matricial de los mecanismos de reacción y asimismo integrarse en un algoritmo de cómputo. La matríz que escribimos a continuación representa al paquete cinético que acabamos de analizar:

	A	B	C	D	E
Reacción 1	-1	-1	-1	1	1
Reacción 2	1	0	0	-2	1
Reacción 3	0	0	1	1	-1

ésta es una matríz de enteros, cuyos elementos indican las veces que un compuesto aparece en una cierta reacción, mientras que el signo indica de qué lado de la reacción se encuentra la sustancia. De esta manera podemos construir una expresión que asociamos a cada reacción en base a los elementos de esta matríz como sigue:

$$P(1) = K_1^D[A][B][C] - K_1^R[D][E]$$

$$P(2) = K_2^D[D][D] - K_2^R[A][E]$$

$$P(3) = K_3^D[C][D] - K_3^R[E]$$

esto nos permite escribir las derivadas respecto al tiempo para las concentraciones en la forma siguiente:

$$\frac{d}{dt}[A] = -P(1) + P(2)$$

$$\frac{d}{dt}[B] = -P(1)$$

$$\frac{d}{dt}[C] = -P(1) + P(3)$$

$$\frac{d}{dt}[D] = P(1) - P(2) + P(3)$$

$$\frac{d}{dt}[E] = P(1) + P(2) - P(3)$$

esta es la manera más compacta de escribir las ecuaciones para la variación de la composición respecto al tiempo, lo que nos facilita enormemente el manejo de muchas reacciones químicas y nos disminuye también la probabilidad de errores. Esta representación matricial fué aplicada en nuestro programa de cómputo, para resolver un sistema en el que fácilmente pueden añadirse reacciones que se consideren importantes o eliminar reacciones intrascendentes.

3.4 Método de Gear

Un paquete de reacciones químicas se resuelve mediante ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales, como se mencionó en la sección anterior. La cantidad de ecuaciones a resolver es igual al número de especies presentes en la mezcla y la solución numérica que se desea es en términos de condiciones iniciales.

Existe en la literatura suficiente material bibliográfico sobre métodos numéricos que permiten la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias, como por ejemplo, Newton-Rampson y Runge-Kutta entre otros, pero para los casos de combustión, el conjunto de ecuaciones a resolver presenta ciertas singularidades que hacen inaplicables estos

métodos, pues divergen.

La problemática que se presenta en estos casos esta relacionada con el método de integración y con el valor numérico que adquieren las derivadas temporales de las especies de acuerdo con la cinética química. Respecto al método de integración, debemos asegurar que el paso en el tiempo sea lo suficientemente pequeño para considerar que el sistema de ecuaciones es lineal, y éste es el primer problema, pues algunas especies sufren cambios muy pequeños en su concentración, mientras que otras cambian radicalmente. Cuando esto ocurre, es menester calcular de antemano el paso de integración apropiado que permita la linearidad de todas las variables que se integran y eso no es simple. Afortunamente, este problema fué resuelto por C. W. Gear en 1972 y su método numérico ha sido implementado por A. C. Hindmarsh(1974). También existen librerías especializadas, como por ejemplo NAG, IMSL y otras que incluyen rutinas que resuelven este tipo sistemas de ecuaciones muy particulares. En la literatura este problema se conoce con el nombre de "Rigidez".

No es de nuestro interés el estudio de los métodos numéricos involucrados en nuestro tratamiento, sino solo el diseñar los programas que hagan uso de librerías para resolver nuestros problemas y completar nuestro estudio. Para este caso, hemos implementado un programa, cuyo próposito es plantear las ecuaciones de acuerdo a una cinética de combustión y llamar a una rutina que resuelve el sistema de ecuaciones. Este programa puede resolver cualquier paquete cinético, con la única restricción dada por la capacidad de memoria de una computadora estandar.

3.5 Resultados de la combustión

La aplicación del programa se hace de manera local, esto es, en una región localizada del spray, en donde

previamente se conocen la temperatura y la concentración de combustible evaporado (resultados del programa SAtom, descrito en el capítulo anterior). Para cada elemento de volumen donde se aplica la cinética es necesario primeramente calcular la concentración de los productos del rompimiento de hidrocarburos (sección 3.1). Dadas las concentraciones a un tiempo dado es posible conocerlas después de un periodo "razonable" de tiempo, por ejemplo, para $\Delta t=10^{-9}$Seg.

Para ilustrar los resultados, hemos estudiado un problema idealizado, en donde consideramos una cinética básica de diecisiete reacciones involucrando quince especies químicas.

Del paquete de reacciones que se mostró en la sección 3.2 se escogieron las siguientes: R.1, R.3, R.4, R.5, R.6, R.9, C.1, C.4, H.1, H.2, H.3, H.8, H.9, H.10, N.6, S.1 y S.2; las características de estas reacciones se dan en el apéndice B. Se consideró una temperatura de 2000 K y las siguientes concentraciones iniciales para las especies involucradas.

$$[\,H\,] = 1.15 \times 10^{-9} \quad mol/cc$$
$$[\,O\,] = 4.45 \times 10^{-10} \quad mol/cc$$
$$[\,N\,] = 4.44 \times 10^{-10} \quad mol/cc$$
$$[\,H_2\,] = 4.25 \times 10^{-2} \quad mol/cc$$
$$[\,O_2\,] = 9.24 \times 10^{-4} \quad mol/cc$$
$$[\,N_2\,] = 5.55 \times 10^{-5} \quad mol/cc$$
$$[\,OH\,] = 1.50 \times 10^{-10} \quad mol/cc$$
$$[HO_2] = 1.77 \times 10^{-8} \quad mol/cc$$
$$[H_2O] = 8.62 \times 10^{-4} \quad mol/cc$$
$$[NO] = 8.83 \times 10^{-12} \quad mol/cc$$
$$[NO_2] = 3.95 \times 10^{-9} \quad mol/cc$$
$$[CO] = 1.30 \times 10^{-7} \quad mol/cc$$
$$[CO_2] = 7.00 \times 10^{-3} \quad mol/cc$$
$$[SO_2] = 1.25 \times 10^{-4} \quad mol/cc$$
$$[SO_3] = 5.15 \times 10^{-10} \quad mol/cc$$

En las gráficas que siguen se presentan los resultados de este programa, que muestran claramente la

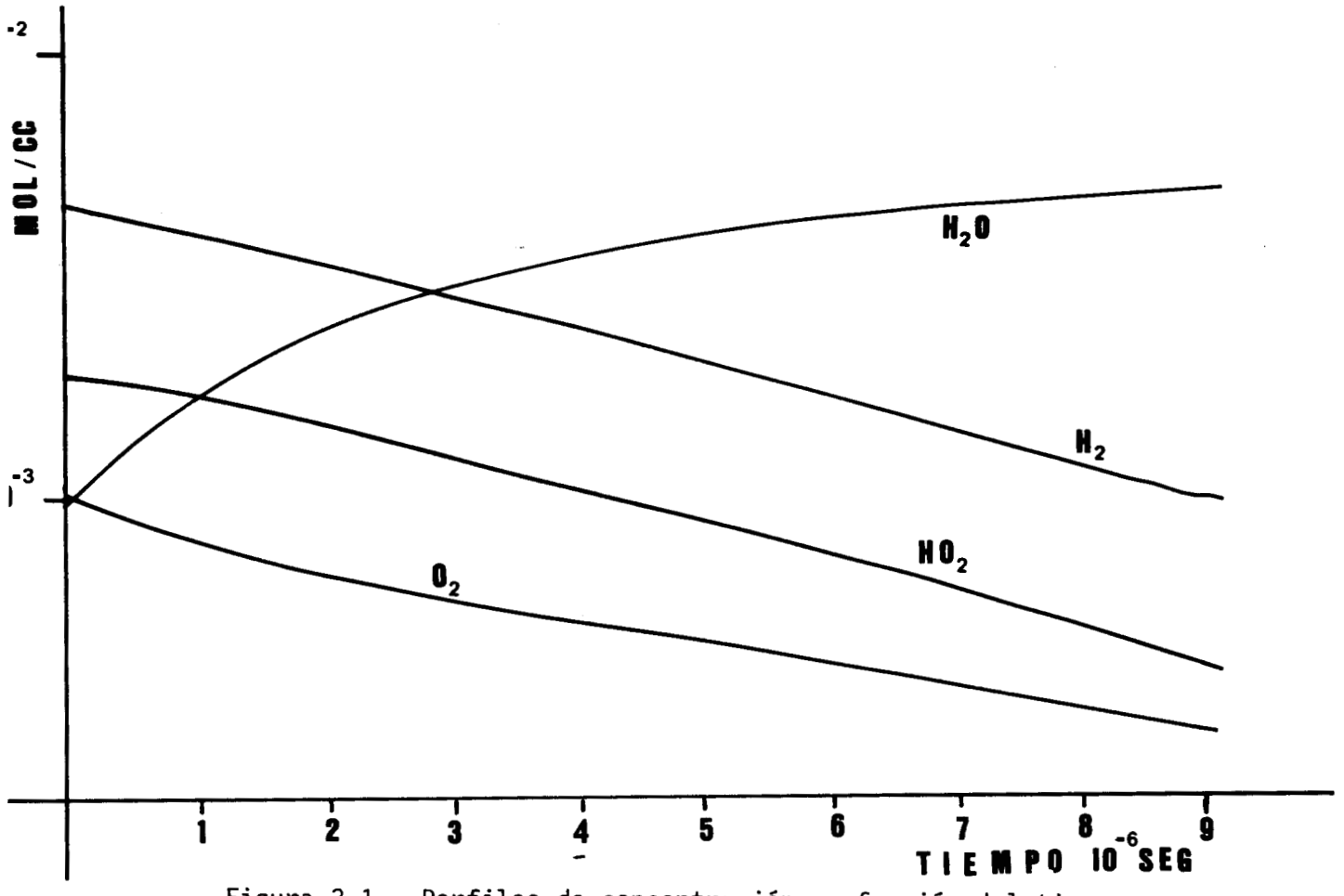


Figura 3.1. Perfiles de concentración en función del tiempo.

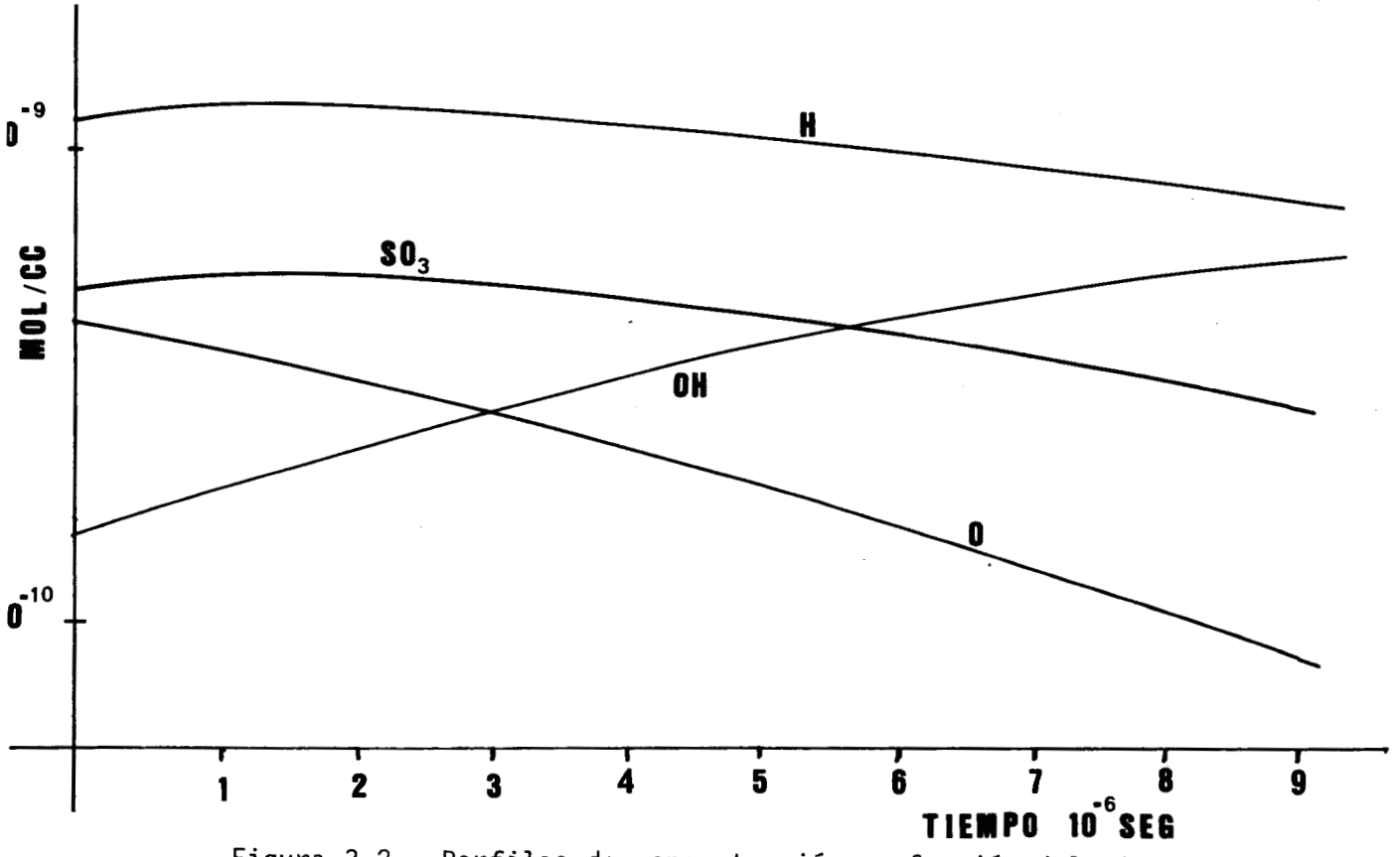


Figura 3.2. Perfiles de concentración en función del tiempo.

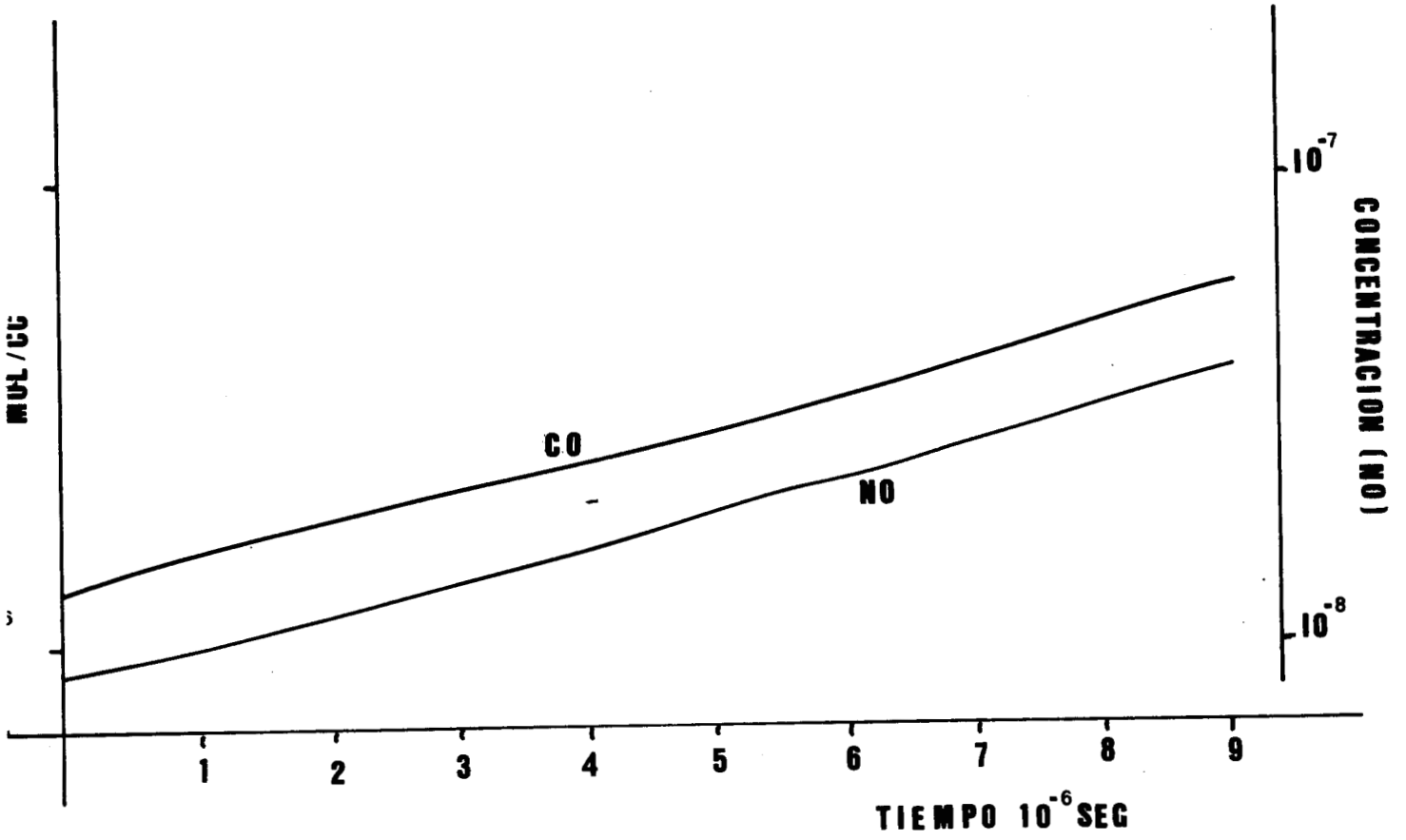


Figura 3.3. Perfiles de concentración en función del tiempo.

variación de la concentración de las especies respecto al tiempo para intervalos de microsegundos.

En estos cálculos tanto la temperatura como las condiciones iniciales en las concentraciones se han tomado de manera arbitraria; de hecho con respecto a un caso típico de combustión de hidrocarburos, podemos decir que dichas condiciones son un tanto extremas. Esto se ha hecho así con el objeto de examinar los efectos de las velocidades de reacción. En un caso real será necesario que para cada elemento de volumen se apliquen las condiciones que resulten de la evolución del spray.

Para el caso particular ilustrado en las figuras es claro que la concentración cambia de manera apreciable en intervalos de tiempo de microsegundos. Otro resultado importante del programa implementado es que se alcanza un estado estacionario para las concentraciones en alrededor de 100 pasos de reacción y este es un comportamiento general. Este dato es de importancia para darse cuenta de que las reacciones son rápidas comparadas con tiempos hidrodinámicos, de manera que se justifica ampliamente el estudiar la cinética de combustión de manera independiente a la hidrodinámica del problema.

CAPITULO CUARTO

TERMODINAMICA IRREVERSIBLE

En este capítulo deducimos las ecuaciones de balance para un sistema inhomogéneo, constituido por una gran cantidad de gotas inmersas en una fase gaseosa multicomponente que las arrastra. El punto de partida lo constituyen los métodos de la Termodinámica Irreversible, en el caso de la fase gaseosa usamos el tratamiento habitual para mezclas, mientras que para las gotas introducimos una previa clasificación por tamaños, formando conjuntos de gotas que tienen en comun un tamaño característico. A esos subconjuntos les denominamos sectores y debido a que en cada elemento de volúmen hay una gran cantidad de ellos, les asignamos propiedades hidrodinámicas.

4.1 Definición de Variables

En primer lugar nos ocupamos de la mezcla de gases, que llamaremos fase contínua, cuya densidad denotamos por $\rho_c(\vec{x},t)$, que depende de la posición y del tiempo y puede escribirse en términos de las densidades $\rho_\gamma(\vec{x},t)$ de las N especies γ que componen la mezcla,

$$\rho_c(\vec{x},t) = \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma(\vec{x},t) \qquad (4.1)$$

de igual manera definimos la velocidad hidrodinámica $\vec{u}_c(\vec{x},t)$ en términos de las velocidades hidrodinámicas $\vec{v}_\gamma(\vec{x},t)$ de las especies, como sigue:

$$\rho_c(\vec{x},t)\vec{u}_c(\vec{x},t) = \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma(\vec{x},t)\vec{v}_\gamma(\vec{x},t) \qquad (4.2)$$

cualquier otra propiedad $\psi_c(\vec{x},t)$ de la fase contínua, linalmente dependiente de las variables hidrodinámicas, puede escribirse:

$$\rho_c(\vec{x},t)\psi_c(\vec{x},t) = \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma(\vec{x},t)\psi_\gamma(\vec{x},t) \qquad (4.3)$$

El spray aquí, es visto como una fase líquida dispersa, cuyos elementos (gotas) mantienen contacto e intercambian masa, momento y energía con la fase gaseosa. En este problema consideramos que la fase dispersa está constituida por una enorme cantidad de gotas, tal que nos permita hacer una clasificación de acuerdo al tamaño de éstas. En primer lugar subdividimos el espectro de tamaños en M radios característicos R_k $(k=1,M)$ y definimos el sector k como el subconjunto $N_k(\vec{x},t)$ de gotas con radios comprendidos en el intervalo $R_k \pm \Delta R_k$ de manera que, el número total de gotas $N_T(\vec{x},t)$ contenidas en el elemento de volúmen $V(\vec{x},t)$ se pueda escribir de la manera siguiente:

$$N_T(\vec{x},t) = \sum_{k=1}^{M} N_k(\vec{x},t) \qquad (4.4)$$

considerando que las gotas son esféricas, podemos definir la densidad $\rho_k(\vec{x},t)$ para cada sector k y luego calcular la densidad de masa de la fase dispersa $\rho_d(\vec{x},t)$.

$$\rho_k(\vec{x},t) = \frac{4}{3}\pi\,\rho_L\,N_k(\vec{x},t)\,R_k^3 \qquad (4.5)$$

$$\rho_d(\vec{x},t) = \sum_{k=1}^{M}\rho_k(\vec{x},t) \qquad (4.6)$$

donde ρ_L es la densidad del líquido del cual están formadas las gotas y se considera constante. Si a cada sector k le asignamos una velocidad $\vec{v}_k(\vec{x},t)$, entonces podemos escribir la velocidad hidrodinámica para la fase dispersa $\vec{u}_d(\vec{x},t)$.

$$\rho_d(\vec{x},t)\vec{u}_d(\vec{x},t) = \sum_{k=1}^{M}\rho_k(\vec{x},t)\vec{v}_k(\vec{x},t) \qquad (4.7)$$

en general, cualquier función lineal $\psi_d(\vec{x},t)$ puede escribirse en términos de las correspondientes funciones $\psi_k(\vec{x},t)$ de los sectores.

$$\rho_d(\vec{x},t)\psi_d(\vec{x},t) = \sum_{k=1}^{M}\rho_k(\vec{x},t)\psi_k(\vec{x},t) \qquad (4.8)$$

caracterizamos al sistema completo por su densidad ρ y su velocidad hidrodinámica $\vec{u}$ de manera que:

$$\rho(\vec{x},t) = \rho_c(\vec{x},t) + \rho_d(\vec{x},t) \qquad (4.9)$$

$$\rho(\vec{x},t)\vec{u}(\vec{x},t) = \rho_c(\vec{x},t)\vec{u}_c(\vec{x},t) + \rho_d(\vec{x},t)\vec{u}_d(\vec{x},t) \qquad (4.10)$$

$$\rho(\vec{x},t)\psi(\vec{x},t) = \rho_c(\vec{x},t)\psi_c(\vec{x},t) + \rho_d(\vec{x},t)\psi_d(\vec{x},t) \qquad (4.11)$$

Finalmente, definimos las velocidades relativas

para las componentes de la mezcla $\vec{w}_\gamma(\vec{x},t)$ y para los sectores de gotas $\vec{w}_k(\vec{x},t)$ como sigue:

$$\vec{w}_\gamma(\vec{x},t) = \vec{v}_\gamma(\vec{x},t) - \vec{u}(\vec{x},t) \tag{4.12}$$

$$\vec{w}_k(\vec{x},t) = \vec{v}_k(\vec{x},t) - \vec{u}(\vec{x},t) \tag{4.13}$$

incluimos una relación para la función ψ, que resulta muy útil para los cálculos posteriores

$$\rho\vec{u}\psi = \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma \vec{v}_\gamma \psi_\gamma + \sum_{k=1}^{M} \rho_k \vec{v}_k \psi_k + \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma \vec{w}_\gamma (\psi - \psi_\gamma) + \sum_{k=1}^{M} \rho_k \vec{w}_k (\psi - \psi_k) \tag{4.14}$$

4.2 Conservación de la Masa

Como lo anotamos antes, nuestro sistema está formado por una fase continua y otra dispersa, que interactuan intercambiando masa, momento y energía. Con el objeto de aplicarle a la fase dispersa un tratamiento de caracter hidrodinámico, consideraremos que el número de gotas que se encuentran en cada elemento de volúmen es suficientemente grande para que la hipótesis del continuo sea aplicable. Para asignar variables locales introducimos el concepto de sector, cuyos elementos son gotas de un cierto tamaño y que se encuentran distribuidas en todo el elemento de volúmen. De esta manera, el conjunto total de gotas contenidas en el elemento de volúmen, puede verse en cierta forma, como una mezcla de sectores. Esto nos permite asignar una densidad, una velocidad y una energía cinética a cada sector, en base a promedios de las propiedades correspondientes de las gotas.

En primer lugar nos ocupamos de la masa total por unidad de volúmen $\rho(\vec{x},t)$ del sistema completo y aplicamos la ley de conservación de la masa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \mathrm{div}(\rho\vec{u}) = 0 \qquad (4.15)$$

la sustitución directa de las ecuaciones (4.1), (4.2), (4.6), (4.7), (4.9) y (4.10) en (4.15), permite escribirla en términos de las variables de los gases y de los sectores

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho_\gamma) + \mathrm{div}(\rho_\gamma\vec{v}_\gamma)\right] + \sum_{k=1}^{M}\left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \mathrm{div}(\rho_k\vec{v}_k)\right] = 0 \qquad (4.16)$$

puesto que nuestro interes es escribir ecuaciones de balance para los gases y las gotas separadamente, vamos a introducir en la ecuación (4.16) dos términos que actuarán como fuentes o sumideros de masa, de manera que la masa perdida por la fase dispersa pase a formar parte de la fase gaseosa. Una vez introducidos estos términos hacemos la hipotesis de que las ecuaciones se pueden separar en la forma siguiente:

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho_\gamma) + \mathrm{div}(\rho_\gamma\vec{v}_\gamma)\right] = \phi^m \qquad (4.17)$$

$$\sum_{k=1}^{M}\left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \mathrm{div}(\rho_k\vec{v}_k)\right] = -\phi^m \qquad (4.18)$$

en donde ϕ^m es un término "fuente" que representa la transferencia de masa entre los sectores y las especies de la mezcla. La fuente de masa que aparece en la ecuación (4.17) representa la cantidad de vapores que han perdido las gotas por evaporación y que han pasado a la fase gaseosa. Por otra parte la pérdida de masa de los sectores queda representada en el término fuente que tiene signo negativo.

La fuente ϕ^m tiene unidades de masa por unidad de tiempo y por unidad de volúmen y representa la misma cantidad en (4.17) y (4.18), sin embargo existe diferencia en cuanto al estado físico en que se encuentra la materia. Efectivamente, en la ecuación (4.17) nos referimos a una ganancia de gases, mientras que en (4.18) nos referimos a una pérdida de líquido.

En este trabajo se considera unicamente la evaporación de gotas, pero es claro que dentro de este tratamiento pueden incluirse los efectos de condensación, coalescencia y posible rompimiento de gotas.

Tomando en cuenta unicamente la evaporación de las gotas, podemos escribir un par de ecuaciones para entender de manera más clara el significado de esta fuente de masa:

$$\phi^m = \sum_{\gamma=1}^{N} \phi_\gamma^m = \sum_{k=1}^{M} \phi_k^m \qquad (4.19)$$

donde ϕ_γ^m es la cantidad de masa de la especie γ por unidad de tiempo y por unidad de volúmen que las gotas transfieren a la fase gaseosa, mientras que ϕ_k^m se refiere a la pérdida de masa de las gotas asociadas al sector k. La sustitución de (4.19) en (4.17), (4.18) y luego en (4.16), nos permite escribir una ecuación de restricción para las fuentes:

$$\sum_{\gamma=1}^{N} \phi_\gamma^m - \sum_{k=1}^{M} \phi_k^m = 0 \qquad (4.20)$$

las fuentes de masa ϕ_γ^m y ϕ_k^m tienen contribuciones que necesariamente deben desglosarse. Hemos hecho un examen detallado al respecto y encontramos las siguientes relaciones:

$$\phi^m_\gamma = \sum_{k=1}^{M} \phi^m_{k\to\gamma} + \sum_{\zeta=1}^{N_r} \phi^m_{\zeta\gamma} \qquad (4.21)$$

$$\phi^m_k = \sum_{\gamma=1}^{N} \phi^m_{k\to\gamma} + \sum_{j=1}^{M} \phi^m_{jk} \qquad (4.22)$$

en donde $\phi^m_{k\to\gamma}$ es la contribución a la especie γ que proviene de las gotas del sector k. La contribución ϕ^m_{jk} nos mide la cantidad de masa por unidad de tiempo asociada a las gotas que al disminuir de tamaño dejan de pertenecer al sector k, y a su vez el aumento de masa provocado porque gotas del sector $k+1$ pasen a formar parte del sector k. Naturalmente, imponemos la condición de que las gotas del sector j sean más grandes que las del sector k. Por simplicidad, en este problema no tomamos en cuenta los choques entre gotas, pero si ello fuera necesario, habrá que añadir una contribución extra en la ecuación (4.22), que contenga los efectos de la colisión.

La contribución $\phi^m_{\zeta\gamma}$ esta relacionada con los cambios en la composición que ocurren en la fase gaseosa por efecto de reacciones químicas, es crucial en problemas de combustión y se determina en base a una cinética química. Desde el punto de vista de la termodinámica irreversible, estos términos estarían dados por los correspondientes coeficientes estequiométricos multiplicados por las velocidades de reacción.

Finalmente y recurriendo nuevamente a una hipotesis de aditividad entre las componentes de los gases y los diversos sectores de la fase dispersa, llegamos al establecimiento de las ecuaciones de balance de masa correspondientes

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_\gamma) + \mathrm{div}(\rho_\gamma \vec{v}_\gamma) = \phi^m_\gamma \qquad (4.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \mathrm{div}(\rho_k \vec{v}_k) = -\phi_k^m \qquad (4.24)$$

que se obtienen de (4.17) y (4.18) respectivamente.

4.3 Balance de Momento

De igual manera que en la sección anterior, establecemos ahora, un balance de momento para el sistema completo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) + \mathrm{div}(\rho\vec{u}\vec{u} + \mathbb{P}) = \rho\vec{f} \qquad (4.25)$$

en donde $\mathbb{P}$ es el tensor de presiones y $\rho\vec{f}$ es la fuerza volumétrica externa que actua sobre el sistema. La parte isotrópica del tensor de presiones $\mathbb{P}$ puede interpretarse como la presión hidrostática P del sistema completo. Esto nos permite separar los efectos viscosos de la siguiente manera:

$$\mathbb{P} = P\mathbb{I} + \mathbb{Z} \qquad (4.26)$$

en donde $\mathbb{I}$ es el tensor unidad y $\mathbb{Z}$ es el tensor viscoso asociado al sistema completo.

$$\mathbb{Z} = \mathbb{Z}_c + \mathbb{Z}_d \qquad (4.27)$$

Vamos a introducir una hipótesis de aditividad para el tensor viscoso, con el objeto de dar el tratamiento habitual al tensor viscoso $\mathbb{Z}_c$ de la fase continua, y que nos permita separar las contribuciones de la fase dispersa; el significado físico del tensor viscoso asociado con la fase

dispersa $\mathbb{Z}_d$ dista mucho de ser claro y menos aún si nos empeñamos en permanecer dentro del contexto de la termodinámica irreversible, ya que lo único que se puede decir, es que representa la contribución irreversible del transporte de momento causado por las gotas. En el capítulo siguiente, desarrollamos la teoría cinética de un spray y deducimos las ecuaciones de balance para este mismo problema. Allí aparecen de manera natural los tensores viscosos y podemos adelantar, que la interpretación física de $\mathbb{Z}_d$ puede darse en base a la dispersión de las velocidades relativas de las gotas. Aclarado el punto, continuamos con nuestro tratamiento, representando a los tensores viscosos en términos de sus respectivas contribuciones:

$$\mathbb{Z}_c = \sum_{\gamma=1}^{N} \mathbb{Z}_\gamma \qquad\qquad \mathbb{Z}_d = \sum_{k=1}^{M} \mathbb{Z}_k \tag{4.28}$$

en donde $\mathbb{Z}_\gamma$ y $\mathbb{Z}_k$ son los tensores viscosos asociados con las especies y los subconjuntos de gotas respectivamente. La fuerza volumétrica externa $\rho\vec{F}$ puede escribirse también en términos de sus contribuciones:

$$\rho\vec{F} = \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma \vec{F}_\gamma + \sum_{k=1}^{M} \rho_k \vec{F}_k \tag{4.29}$$

por sustitución directa de las ecuaciones (4.1) a (4.14), (4.28) y (4.29) en (4.25) y con la hipotesis de aditividad ya mencionada, obtenemos ecuaciones de balance para especies y sectores, como sigue:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_\gamma \vec{v}_\gamma) + \operatorname{div}\left[\rho_\gamma \vec{v}_\gamma \vec{v}_\gamma - \rho_\gamma \vec{w}_\gamma \vec{w}_\gamma + \mathbb{Z}_\gamma \right] + \beta_\gamma \nabla P - \rho_\gamma \vec{F}_\gamma = -\vec{\phi}^{P}_{\gamma} \tag{4.30}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \vec{v}_k) + \operatorname{div}\left[\rho_k \vec{v}_k \vec{v}_k - \rho_k \vec{w}_k \vec{w}_k + \mathbb{Z}_k \right] + \beta_k \nabla P - \rho_k \vec{F}_k = \vec{\phi}^{P}_{k} \tag{4.31}$$

en donde β_γ y β_k son las contribuciones al grediente de presión de las especies y sectores respectivamente. Estos coeficientes fenomenológicos deben cumplir con la restricción siguiente:

$$\sum_{\gamma=1}^{N} \beta_\gamma + \sum_{k=1}^{M} \beta_k = 1 \qquad (4.32)$$

De manera similar que en el caso de las masas, hemos introducido aquí, las fuentes de momento $\vec{\phi}^P_\gamma$ y $\vec{\phi}^P_k$ que aparecen en (4.30) y (4.31). Estas fuentes miden la transferencia de momento entre las fases y estan restringidas por la ecuación:

$$\sum_{\gamma=1}^{N} \vec{\phi}^P_\gamma - \sum_{k=1}^{M} \vec{\phi}^P_k = 0 \qquad (4.33)$$

para asegurar el cumplimiento de la ecuación de balance global del sistema (4.25). Las fuentes de momento $\vec{\phi}^P_\gamma$ y $\vec{\phi}^P_k$ también pueden desglozarse en función de sus contribuciones, como en el caso de (4.21) y (4.22). En este caso las ecuaciones son:

$$\vec{\phi}_\gamma = \sum_{k=1}^{M} \vec{\phi}^P_{\gamma\to k} \qquad (4.34)$$

$$\vec{\phi}^P_k = \sum_{\gamma=1}^{N} \vec{\phi}^P_{\gamma\to k} + \sum_{j=1}^{M} \vec{\phi}^P_{jk} \qquad (4.35)$$

en donde $\vec{\phi}^P_{\gamma\to k}$ es el momento por unidad de tiempo y por unidad de volúmen que la especie γ transfiere a las gotas del sector k y $\vec{\phi}^P_{jk}$ es el momento involucrado en las gotas que inicialmente pertenecian al sector j, pero que por disminución de su tamaño ahora pertenecen al sector k.

4.4 Balance de Energías Cinética y Potencial

Las ecuaciones de balance para la energía cinética se obtienen del producto escalar de la velocidad con las ecuaciones de momento (4.30) y (4.31), ellas son:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tfrac{1}{2}\rho_\gamma v_\gamma^2) + \mathrm{div}\left[\tfrac{1}{2}\rho_\gamma v_\gamma^2 \vec{v}_\gamma - \rho_\gamma \vec{w}_\gamma (\vec{v}_\gamma \circ \vec{w}_\gamma) + \vec{v}_\gamma \circ \mathbb{Z}_\gamma\right] + \tag{4.36}$$

$$+ \rho_\gamma \vec{w}_\gamma \vec{w}_\gamma : \nabla \vec{v}_\gamma = \mathbb{Z}_\gamma : \nabla \vec{v}_\gamma - \beta_\gamma \vec{v}_\gamma \circ \nabla P + \rho_\gamma \vec{v}_\gamma \circ \vec{F}_\gamma - \vec{v}_\gamma \circ \vec{\phi}_\gamma^{\,p} - \tfrac{1}{2} v_\gamma^2 \phi_\gamma^m$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tfrac{1}{2}\rho_k v_k^2) + \mathrm{div}\left[\tfrac{1}{2}\rho_k v_k^2 \vec{v}_k - \rho_k \vec{w}_k (\vec{v}_k \circ \vec{w}_k) + \vec{v}_k \circ \mathbb{Z}_k\right] + \tag{4.37}$$

$$+ \rho_k \vec{w}_k \vec{w}_k : \nabla \vec{v}_k = \mathbb{Z}_k : \nabla \vec{v}_k - \beta_k \vec{v}_k \circ \nabla P + \rho_k \vec{v}_k \circ \vec{F}_k + \vec{v}_k \circ \vec{\phi}_k^{\,p} + \tfrac{1}{2} v_k^2 \phi_k^m$$

estas ecuaciones suponen la validez de las ecuaciones de conservación de masa y la de balance de momento, pero no contienen hipótesis adicionales. En ellas aparecen las fuentes de masa y de momento, cuya combinación actua como fuente de la energía cinética.

Es conveniente escribir las ecuaciones de balance para w_γ^2 y w_k^2 que han de utilizarse en cálculos posteriores. Ellas se obtienen con desarrollo laborioso, aunque directo de las ecuaciones ya obtenidas, en particular se toma el producto escalar de $\vec{w}_\gamma$ con la diferencia entre las ecuaciones (4.30) y (4.25), dando como resultado la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tfrac{1}{2}\rho_\gamma w_\gamma^2) + \mathrm{div}(\tfrac{1}{2}\rho_\gamma w_\gamma^2 \vec{u}) - \tfrac{1}{2} w_\gamma^2 \mathrm{div}(\rho_\gamma \vec{u}) + \vec{w}_\gamma \circ \mathrm{div}(\mathbb{Z}_\gamma - Y_\gamma \mathbb{Z}) +$$

$$+ \rho_\gamma \vec{w}_\gamma \vec{w}_\gamma : \nabla \vec{u} + \vec{w}_\gamma \circ (\mathbb{Z} \circ \nabla Y_\gamma) = \vec{w}_\gamma \circ \left[-\beta_\gamma \nabla P + \rho_\gamma (\vec{F}_\gamma - \vec{F}) - \vec{\phi}_\gamma^{\,p} + \right.$$

$$\left. + (\tfrac{1}{2}\vec{w}_\gamma - \vec{u})\phi_\gamma^m\right] \tag{4.38}$$

del producto escalar de $\vec{w}_k$ con la diferencia de las ecuaciones (4.31) y (4.25), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tfrac{1}{2}\rho_k w_k^2) + \mathrm{div}(\tfrac{1}{2}\rho_k w_k^2 \vec{u}) - \tfrac{1}{2} w_k^2 \mathrm{div}(\rho_k \vec{u}) + \vec{w}_k \circ \mathrm{div}(\bar{Z}_k - Y_k \bar{Z}) +$$

$$+ \rho_k \vec{w}_k \vec{w}_k : \nabla \vec{u} + \vec{w}_k \circ (\bar{Z} \circ \nabla Y_k) = \vec{w}_k \circ [-\beta_k \nabla P + \rho_k (\vec{F}_k - \vec{F}) + \vec{\phi}_k^p +$$

$$- (\tfrac{1}{2}\vec{w}_k - \vec{u}) \phi_k^m] \qquad (4.39)$$

donde Y_γ es la fracción masa de la especie γ definida como el cociente de la densidad ρ_γ y la densidad total ρ del sistema, Y_k es la fracción masa del sector k.

La ecuación de balance para la energía cinética total, se obtiene sumando las correspondientes ecuaciones para todas las especies y para todos los sectores del sistema. El resultado es el siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tfrac{1}{2}\rho u^2) + \mathrm{div}(\tfrac{1}{2}\rho u^2 \vec{u} + \vec{u} \circ \bar{Z}) = \vec{u} \circ \nabla P + \rho \vec{u} \circ \vec{F} + \bar{Z} : \nabla \vec{u} \qquad (4.40)$$

Para obtener la ecuación de balance para la energía potencial, suponemos que las fuerzas volumétricas que actúan sobre el sistema son derivables de funciones escalares, esas funciones representan a la energía potencial por unidad de masa, y pediremos que sean independientes del tiempo, esto es:

$$\vec{F}_k = \nabla \Psi_k \qquad \text{y} \qquad \vec{F}_\gamma = \nabla \Psi_\gamma \qquad (4.41)$$

$$\rho \vec{F} = -\rho \nabla \Psi + \sum_{\gamma=1}^{N} \rho \Psi_\gamma \nabla Y_\gamma + \sum_{k=1}^{M} \rho \Psi_k \nabla Y_k \qquad (4.42)$$

donde Ψ denota la energía potencial total. Si ahora tomamos la derivada de $\rho\Psi$ respecto al tiempo, obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Psi) + \mathrm{div}(\rho\vec{u}\Psi) = -\rho\vec{F}\cdot\vec{u} - \sum_{\gamma=1}^{N}\Psi_\gamma\nabla\cdot(\rho_\gamma\vec{v}_\gamma) - \sum_{k=1}^{M}\Psi_k\nabla\cdot(\rho_k\vec{v}_k) +$$

$$+ \sum_{\gamma=1}^{N}\Psi_\gamma\phi_\gamma^m + \sum_{k=1}^{M}\Psi_k\phi_k^m \qquad (4.43)$$

que es la ecuación de balance para la energía potencial total del sistema.

4.5 Conservación de la Energía Total.

Vamos a escribir la energía total E de nuestro sistema, como una superposición de las energías cinética, potencial e interna,

$$\rho E = \frac{1}{2}\rho u^2 + \rho\Psi + \rho U \qquad (4.44)$$

donde U es la energía interna por unidad de masa. El flujo total de energía $\vec{J}_E$ lo definimos como sigue:

$$\vec{J}_E = \rho U\vec{u} + \mathbb{Z}\cdot\vec{u} + \vec{q} + \sum_{\gamma=1}^{N}\rho_\gamma\vec{w}_\gamma\Psi_\gamma + \sum_{k=1}^{M}\rho_k\vec{w}_k\Psi_k \qquad (4.45)$$

donde $\rho U\vec{u}$ representa el flujo convectivo de energía, $\mathbb{Z}\cdot\vec{u}$ es el trabajo mecánico, $\vec{q}$ el flujo de calor y los últimos términos de (4.45) nos dan la contribución de los flujos difusivos $\rho_\gamma\vec{w}_\gamma$ y $\rho_k\vec{w}_k$.

Postulamos que la energía total del sistema se conserva y por tanto:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \mathrm{div}(J_E) = 0 \qquad (4.46)$$

La sustitución directa de las ecuaciones (4.44), (4.45), (4.40) y (4.43) en la ecuación (4.46), nos lleva a la ecuación de balance de energía interna para nuestro sistema.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U) + \mathrm{div}(\rho U\vec{u} + \vec{q}) = -\bar{\bar{Z}}:\nabla\vec{u} + \sum_{\gamma=1}^{N}\rho_\gamma\vec{w}_\gamma\cdot\vec{F}_\gamma + \sum_{k=1}^{M}\rho_k\vec{w}_k\cdot\vec{F}_k + \\ + \sum_{\gamma=1}^{N}\Psi_\gamma\phi_\gamma^m + \sum_{k=1}^{M}\Psi_k\phi_k^m \qquad (4.47)$$

Esta ecuación contiene a las fuentes de masa multiplicadas por los potenciales correspondientes. Si estas fuentes no alteran el potencial por unidad de masa, estos términos se anulan, recuperando con ello la ecuación de balance habitual.

Nuestro siguiente paso es calcular la ecuación de balance de la entropía, para lo cual usamos la hipótesis de equilibrio local, que obtenemos de una relación de Gibbs escrita para un sistema lagrangiano, como sigue:

$$T\frac{DS}{Dt} = \frac{DU}{Dt} + P\frac{D}{Dt}\frac{1}{\rho} - \sum_{\gamma=1}^{N}\mu_\gamma\frac{D}{Dt}Y_\gamma - \sum_{k=1}^{M}\mu_k\frac{D}{Dt}Y_k \qquad (4.48)$$

donde S es la entropía específica, T es la temperatura local, μ_γ y μ_k son potenciales químicos locales de especies y sectores respectivamente, y $\frac{D}{Dt}$ representa la derivada substancial o lagrangiana.

Puesto que ya se han construido las ecuaciones de balance de la energía interna, de la masa total y de las

fracciones masa, una simple sustitución en (4.48) nos lleva a la ecuación de balance de entropía, que se puede escribir de la manera siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho S) + \mathrm{div}(\vec{J}_s) = C_s \qquad (4.49)$$

$$\vec{J}_s = \rho S\vec{u} + \frac{1}{T}\left[\vec{q} - \sum_{\gamma=1}^{N} \rho_\gamma \mu_\gamma \vec{w}_\gamma - \sum_{k=1}^{M} \rho_k \mu_k \vec{w}_k\right] \qquad (4.50)$$

$$C_s = \vec{q}\circ\nabla\left[\frac{1}{T}\right] - \bar{Z}:\nabla\vec{u} - \frac{1}{T}\sum_{\gamma=1}^{N}(\mu_\gamma + \Psi_\gamma)\phi_\gamma^m - \frac{1}{T}\sum_{\gamma=1}^{N}\rho_\gamma\vec{w}_\gamma\circ(T\nabla\frac{1}{T}\mu_\gamma - \vec{F}_\gamma) +$$

$$+ \frac{1}{T}\sum_{k=1}^{M}(\mu_k + \Psi_k)\phi_k^m - \frac{1}{T}\sum_{k=1}^{M}\rho_\gamma\vec{w}_\gamma\circ(T\nabla\frac{1}{T}\mu_k - \vec{F}_k) \qquad (4.51)$$

en donde $\vec{J}_s$ y C_s se identifican como el flujo y la producción de entropía respectivamente. Como puede verse, las fuentes de masa ϕ_γ^m y ϕ_k^m también aparecen en la producción de entropía.

Ahora podemos escribir la ecuación de balance de entalpía, que obtenemos en base a una relación termodinámica convencional:

$$\frac{DH}{Dt} = T\frac{DS}{Dt} + \frac{1}{\rho}\frac{DP}{Dt} \qquad (4.52)$$

en donde H es la entalpía específica del sistema, que a su vez, podemos expresar como una superposición de las entalpías de las especies H_γ y de los sectores H_k

$$\rho H = \sum_{\gamma=1}^{N}\rho_\gamma H_\gamma + \sum_{k=1}^{M}\rho_k H_k \qquad (4.53)$$

Por sustitución directa de las ecuaciones de balance de masa, de entropía para especies y sectores, y de (4.53) en (4.52), obtenemos la ecuación de balance para la entalpía total del sistema, en donde aparecen desglozadas las contribuciones de especies y sectores. Finalmente, alcanzamos nuestra meta, separando las diversas contribuciones., ellas son:

$$\frac{D}{Dt}\frac{1}{\rho}(\rho_\gamma H_\gamma) = \beta_\gamma \frac{DP}{Dt} - \frac{1}{\rho}(\rho_\gamma \vec{w}_\gamma)\circ(T\nabla\frac{1}{T}\mu_\gamma - \vec{F}_\gamma) - \frac{T}{\rho}\nabla\circ\frac{1}{T}(\vec{q}_\gamma - \rho_\gamma\mu_\gamma\vec{w}_\gamma) +$$

$$+ \frac{T}{\rho}\vec{q}_\gamma\circ\nabla\frac{1}{T} - \frac{1}{\rho}\bar{Z}_\gamma : \nabla\vec{u} + \frac{1}{\rho}(\mu_\gamma - \Psi_\gamma)\phi^m_\gamma + \phi^h_\gamma \qquad (4.54)$$

$$\frac{D}{Dt}\frac{1}{\rho}(\rho_k H_k) = \beta_k \frac{DP}{Dt} - \frac{1}{\rho}(\rho_k \vec{w}_k)\circ(T\nabla\frac{1}{T}\mu_k - \vec{F}_k) - \frac{T}{\rho}\nabla\circ\frac{1}{T}(\vec{q}_k - \rho_k\mu_k\vec{w}_k) +$$

$$+ \frac{T}{\rho}\vec{q}_k\circ\nabla\frac{1}{T} - \frac{1}{\rho}\bar{Z}_k : \nabla\vec{u} + \frac{1}{\rho}(\mu_k - \Psi_k)\phi^m_k - \phi^h_k \qquad (4.55)$$

en donde hemos introducido fuentes de entalpía ϕ^h_γ y ϕ^h_k de la misma manera y con los mismos propósitos que en los balances de masa y de momento. Estas fuentes también estarán restringidas a fin de satisfacer la conservación de la energía total del sistema. La ecuación de restricción es la siguiente:

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\phi^h_\gamma - \sum_{k=1}^{M}\phi^h_k = 0 \qquad (4.56)$$

Hemos construido un conjunto de ecuaciones de balance válidas para un sistema termodinámico en donde se conservan la masa y la energía totales, y que además satisface un balance de momento total. Estas ecuaciones contienen la información básica para atacar cualquier problema con las características del nuestro; sin embargo podemos notar con facilidad que el conjunto de ecuaciones no

está completo, en el sentido de que hay un número mayor de incógnitas que de ecuaciones. Esta particularidad no es esclusiva de nuestro problema, ya que lo mismo sucede con cualquier sistema termodinámico. Es bien sabido que se necesita información fenomenológica adicional o bien un modelo, que a partir de bases microscópicas nos diga cómo son las ecuaciones constitutivas y las correspondientes ecuaciones de estado.

Es claro que para resolver problemas específicos será estrictamente necesario introducir dicha información en nuestras ecuaciones. Por último cabe mencionar que las condiciones de frontera y las condiciones iniciales juegan también un papel importante en la solución de un problema concreto, evidentemente estas características no pueden escribirse en forma general y para cada problema se deberán implementar los métodos que permitan resolver el problema.

Por último y en conexión con los resultados del capítulo segundo, queremos hacer notar que cada barra de los histogramas representa propiedades de cada sector k, las fuentes calculadas corresponden a las fuentes de masa que hemos introducido aquí de manera formal, las matrices de propiedades en celdas contiguas y a tiempos ligeramente diferentes permitirán el cálculo de las derivadas que aparecen en las ecuaciones de balance. Esto nos indica claramente que el programa simulador desarrollado nos dará información importante acerca del comportamiento del sistema.

CAPITULO QUINTO

TEORIA CINETICA PARA SPRAYS

En este capítulo desarrollamos una descripción cinética de un sistema inhomogéneo constituido por un número muy grande de gotas, que representamos mediante una función de distribución de radios. Las gotas se suponen constituidas de una sustancia pura y se encuentran inmersas en una mezcla gaseosa multicomponente.

Suponemos que la función de distribución que nos describe a las gotas, satisface una ecuación de Williams modificada. Suponemos también que cada una de las especies del gas estarán representadas por una función de distribución que satisfacen la ecuación de Boltzmann. Las ecuaciones estarán acopladas a traves de la interacción entre las gotas y las colisiones con las moléculas del gas.

A diferencia del capitulo anterior, en donde hicimos una descripción fenomenológica del problema, ahora deseamos construir las ecuaciones que satisfacen las funciones de distribución correspondientes. Como veremos, la rapidez de evaporación y la fuerza de arrastre se verán afectadas por las colisiones con las moléculas del gas. Esto nos induce a pensar en una evaporación y una fuerza de arrastre efectivas.

Finalmente haremos una comparación entre las ecuaciones de balance obtenidas cinéticamente con las

ecuaciones fenomenológicas del capítulo anterior. Describimos también la conexión con los resultados numéricos que se obtuvieron mediante simulación en el capítulo segundo.

5.1 Modelo Cinético.

En esta sección delineamos el modelo cinético que proponemos para el estudio del spray, al que consideramos como una colección muy grande de gotas inmersas en una mezcla multicomponente de gases que se mueven a través de ella. Suponemos también que cada una de las especies de la mezcla gaseosa puede describirse mediante una función de distribución $\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)$ que a su vez satisface la ecuación de Boltzmann. En este contexto, $\vec{c}_\gamma$ es la velocidad molecular de las partículas de la especie γ, cada una con masa m_γ. De manera que $\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)d\vec{c}_\gamma$ nos indica el número de moléculas de especie γ con velocidad en el intervalo $(\vec{c}_\gamma,\ \vec{c}_\gamma+\Delta\vec{c}_\gamma)$ que se encuentran dentro del elemento de volumen $d\vec{x}$ al tiempo t. Las ecuaciones cinéticas que proponemos son:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)+\vec{c}_\gamma\circ\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)+\vec{F}\circ\frac{\partial}{\partial\vec{c}_\gamma}\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)=$$

$$=\sum_{\alpha=1}^{N}\mathbb{J}_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{F}_\alpha)+\mathbb{J}_{\gamma k}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{G}_k)\qquad(\gamma=1,\ldots,N)\qquad(5.1)$$

donde $\vec{F}$ es la fuerza volumétrica externa por unidad de masa que actua sobre el sistema, $\mathbb{J}_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{F}_\alpha)$ son los terminos de colisión usuales en la ecuación de Boltzmann y que toman en cuenta la interacción binaria entre las moléculas de la especie γ y la especie α. El último término $\mathbb{J}_{\gamma k}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{G}_k)$ mide la interacción entre las moléculas de la especie γ y las gotas; depende de la función de distribución $\mathbb{F}_\gamma$ de la

especie γ, y de la correspondiente función de distribución de las gotas $\mathcal{G}_k$. Existen N ecuaciones acopladas de este tipo, una para cada especie de la mezcla.

Para el spray suponemos que las gotas son esféricas de radio R, que se mueven con velocidad $\vec{v}$ y que se evaporan con rapidez $\dot{R}$. Empleamos también una función de distribución $\mathcal{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)$ de manera que $\mathcal{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)d\vec{x}d\vec{v}$ nos indica la cantidad de gotas que tienen radios comprendidos en el intervalo $(R\ ,\ R+\Delta R)$ con velocidades entre $(\vec{v},\ \vec{v}+\Delta\vec{v})$ contenidos dentro del elemento de volumen $d\vec{x}$ y al tiempo t. La ecuación cinética que proponemos para el spray es parecida a la que propone Williams(1965,1985), a saber,

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t) + \vec{v}\circ\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\mathcal{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t) + \frac{\partial}{\partial R}\left[\dot{R}\mathcal{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)\right] +$$

$$+ \vec{F}\circ\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\mathcal{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t) = \sum_{\gamma=1}^{N}\mathcal{J}_{k\gamma}(\mathcal{G}_k,\mathcal{F}_\gamma) + \mathcal{J}_{kk}(\mathcal{G}_k,\mathcal{G}_k) \qquad (5.2)$$

donde $\mathcal{J}_{k\gamma}(\mathcal{G}_k,\mathcal{F}_\gamma)$ representa la interacción entre la especie γ del gas y las gotas. Consecuentemente la suma de estos términos nos da la contribución de todas las especies.

El término $\mathcal{J}_{kk}(\mathcal{G}_k,\mathcal{G}_k)$ representa la interacción gota-gota, que consideraremos despreciable para un spray diluido. Con el objeto de expresar las integrales de colisión en términos de las funciones de distribución, seguiremos las ideas de la teoria cinética de gases (Chapman,1970).

Para empezar, los terminos de colisión $\mathcal{J}_{\gamma\alpha}$ concernientes a las especies de la mezcla gaseosa estarán dados por el kernel de colisión usual.

$$\mathcal{J}_{\gamma\alpha} = \int\left[\mathcal{F}_\gamma(\vec{\xi}'_\gamma,\vec{x},t)\mathcal{F}_\alpha(\vec{\xi}'_\alpha,\vec{x},t) - \mathcal{F}_\gamma(\vec{\xi}_\gamma,\vec{x},t)\mathcal{F}_\alpha(\vec{\xi}_\alpha,\vec{x},t)\right]g_{\gamma\alpha}d\Gamma_{\gamma\alpha}d\vec{\xi}_\alpha \qquad (5.3)$$

donde $\vec{c}_\gamma$, $\vec{c}_\alpha$, $\vec{c}'_\gamma$ y $\vec{c}'_\alpha$ son velocidades de las partículas de las especies γ y α antes y después de una colisión entre ellas respectivamente, $g_{\gamma\alpha}$ es la magnitud de la velocidad relativa y $d\Gamma_{\gamma\alpha}$ la correspondiente sección transversal de colisión. Las funciones de distribución $\mathbb{F}_\gamma$, $\mathbb{F}_\alpha$ satisfacen la ecuación (5.1), que a su vez está acoplada con la ecuación cinética de las gotas.

Las gotas afectan a la ecuación cinética de los gases, principalmente a través de la integral de colisión $\mathcal{J}_{\gamma k}(\mathbb{F}_\gamma, \mathbb{G}_k)$. Suponemos que la interacción entre las moléculas del gas y las gotas es binaria, en donde $\vec{v}'$, $\vec{c}'_\gamma$ y $d\Gamma_{\gamma\alpha}$ determinan la dinámica de la interacción.

$$\mathcal{J}_{\gamma k}=\int\left[\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}'_\gamma,\vec{x},t)\,\mathbb{G}_k(R';\vec{v}';\vec{x},t)-\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)\,\mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)\right]g_{\gamma k}\,d\Gamma_{\gamma k}\,dR\,d\vec{v}$$
$$(\gamma=1,\ldots,N) \qquad (5.4)$$

en donde R' es el radio de la gota después de la colisión. Recordemos que no hay nucleación ni coalescencia de moléculas del gas sobre las gotas, de manera que el cambio de radio de la gota se debe a la evaporación.

Ahora simplificaremos la integral de colisión que aparece en la ecuación (5.4), haciendo algunas hipótesis acerca de la interacción entre las moléculas del gas y las gotas. Primero tomemos en cuenta que la gota es muy grande comparada con la molécula, de manera que la función de distribución casi no se ve afectada por la colisión con una molécula. Esto nos permite escribir la siguiente aproximación en la ecuación (5.4)

$$\mathbb{G}_k(R';\vec{v}';\vec{x},t) = \mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)$$

empleamos también una hipótesis simplificadora en la que consideramos que los choques con las gotas, reflejan a las moléculas. Esta hipótesis se escribe de la manera siguiente:

$$\vec{c}'_\gamma = -\vec{c}_\gamma$$

Estas dos hipótesis nos permiten escribir la ecuación (5.4) como sigue:

$$J_{\gamma k}(F_\gamma, G_k) = \int G_k(R, \vec{v}, \vec{x}, t)\left[F_\gamma(-\vec{c}_\gamma, \vec{x}, t) - F_\gamma(\vec{c}_\gamma, \vec{x}, t)\right] g_{\gamma k}\, d\Gamma_{\gamma k}\, dR d\vec{v}$$

$$(\gamma = 1, \ldots, N) \qquad (5.5)$$

Ahora discutiremos la integral de colisión $J_{k\gamma}(G_k, F_\gamma)$, que colecta los efectos de las colisiones de las moléculas con la gota. La sección tranversal de colisión es $d\Gamma_{k\gamma}$, la velocidad relativa $g_{k\gamma}$ de manera que:

$$J_{k\gamma} = \int \left[G_k(R', \vec{v}', \vec{x}, t) F_\gamma(\vec{c}'_\gamma, \vec{x}, t) - G_k(R, \vec{v}, \vec{x}, t) F_\gamma(\vec{c}_\gamma, \vec{x}, t)\right] g_{k\gamma}\, d\Gamma_{k\gamma}\, d\vec{c}_\gamma$$

$$(\gamma = 1, \ldots, N) \qquad (5.6)$$

El radio de la gota después de la colisión se calcula a través de la rapidez de evaporación $\dot{R}$, que a su vez puede obtenerse mediante un modelo independiente o a partir de los datos experimentales. Para nuestros propósitos lo escribimos en la forma:

$$R' = R + \int_t^{t+\tau} \dot{R}\, dt = R + \alpha(t, \tau) \qquad (5.7)$$

donde R es el radio antes de la colisión y τ es un tiempo de colisión característico. La velocidad de las gotas después de la colisión $\vec{v}'$, se calcula a partir de un balance de momento. El cambio de momento para una gota es

$$\Delta\vec{P}_k = \frac{4}{3}\pi\rho_L R^3(\vec{v}' - \vec{v}) + \frac{4}{3}\pi\rho_L R^2\alpha\,\vec{v}' \qquad (5.8)$$

donde ρ_L es la densidad del líquido y ΔP_k se calcula hasta primer orden en α. El cambio de momento para las moléculas del gas está dado por el cambio de momento de una molécula multiplicado por $\nu_\gamma\tau$ donde ν_γ es el número de colisiones de moléculas de la especie γ con la gota, por unidad de tiempo. De acuerdo con la hipótesis acerca de la transferencia de momento, que se dió antes de la ecuación (5.5), el cambio de momento para una molécula es $2m_\gamma c_\gamma$, de manera que la conservación de momento nos da

$$\vec{v}' = \vec{v} - 3\,\frac{\alpha}{R}\,\vec{v} + \frac{3}{2\pi\rho_L R^3}\,(m_\gamma\tau\,\nu_\gamma)\vec{c}_\gamma \qquad (5.9)$$

Sustituimos las ecuaciones (5.7), (5.9) en (5.6) y desarrollamos en serie de Taylor hasta primer orden, obteniendo

$$J_{k\gamma}(\mathbb{G}_k,\mathbb{F}_\gamma) = (\eta_{1\gamma}-\eta_{2\gamma})\mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t) + \eta_{1\gamma}\left[-3\frac{\alpha}{R}\vec{v}\circ\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t) + \right.$$

$$\left. + \alpha\frac{\partial}{\partial R}\mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t) + \frac{3}{2\pi\rho_L R^3}(m_\gamma\nu_\gamma\tau)\vec{\eta}_{3\gamma}\circ\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)\right] \qquad (5.10)$$

donde las cantidades $\eta_{1\gamma}$, $\eta_{2\gamma}$ y $\vec{\eta}_{3\gamma}$ dependen de los radios

y velocidades de las gotas, así también como de las propiedades del gas. En efecto,

$$\eta_{1\gamma}(R,\vec{v},\{gas\}) = \int \mathbb{F}_\gamma(-\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)g_{k\gamma}d\Gamma_{k\gamma}d\vec{c}_\gamma \qquad (5.11)$$

$$\eta_{2\gamma}(R,\vec{v},\{gas\}) = \int \mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_i,\vec{x},t)g_{k\gamma}d\Gamma_{k\gamma}d\vec{c}_\gamma \qquad (5.12)$$

$$\vec{\eta}_{3\gamma}(R,\vec{v},\{gas\}) = \int \vec{c}_\gamma \mathbb{F}_\gamma(-\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)g_{k\gamma}d\Gamma_{k\gamma}d\vec{c}_\gamma \qquad (5.13)$$

Estas expresiones contienen la dinámica de la colisión y las propiedades del gas. La sustitución de la ecuación (5.10) en la ecuación (5.2) nos conduce a la ecuación cinética del spray. Esta ecuación contiene algunas de las características de la original, pero está simplificada enormemente gracias a las aproximaciones que hemos señalado, dichas simplificaciones están justificadas en base a la diferencia de tamaños que existe entre moléculas y gotas.

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbb{G}_k + \vec{v}\circ\frac{\partial}{\partial \vec{x}}\mathbb{G}_k + \frac{\partial}{\partial R}\Big[\Big(\dot{R} - \alpha\sum_{\gamma=1}^{N}\eta_{1\gamma}\Big)\mathbb{G}_k\Big] + \Big[\vec{F} + \sum_{\gamma=1}^{N} 3\frac{\alpha}{R}\eta_{1\gamma}\vec{v} +$$

$$(5.14)$$

$$- \frac{1}{R^3}\sum_{\gamma=1}^{N}\delta_\gamma m_\gamma \vec{\eta}_{3\gamma}\Big]\circ\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\mathbb{G}_k = \sum_{\gamma=1}^{N}(\eta_{1\gamma}-\eta_{2\gamma})\mathbb{G}_k - \mathbb{G}_k\Big(\frac{\partial}{\partial R}\alpha\sum_{\gamma=1}^{N}\eta_{1\gamma}\Big)$$

Para obtener esta ecuación hemos definido la cantidad $\delta_\gamma = (3\nu_\gamma\tau)/(2\pi\rho_L)$, y supusimos que el spray es suficientemente diluido para que la interacción entre gotas, representada por la integral de colisión J_{kk} sea despreciable.

Ahora es posible ver la ecuación cinética para el spray de una manera diferente: los primeros dos términos son los usuales en todas las ecuaciones cinéticas y el tercer término da una rapidez de evaporación efectiva $\dot{R}\varepsilon$,

$$\dot{R}\varepsilon = \dot{R} - \alpha \sum_{\gamma=1}^{N} \eta_{1\gamma} \tag{5.15a}$$

que es la rapidez de evaporación para una gota aislada, modificada por la colisión con las moléculas del gas. El cuarto término de la ecuación (5.14) resulta muy interesante, debido a que está dado por la fuerza externa $\vec{F}$ modificada por las colisiones entre las moléculas del gas y las gotas, esta fuerza efectiva $\vec{F}\varepsilon$ depende de las características de las gotas así como de las propiedades del gas. Esperamos que los términos adicionales en esta fuerza volumétrica, nos conduzcan a la fuerza de arrastre.

$$\vec{F}\varepsilon = \vec{F} + \sum_{\gamma=1}^{N} 3\frac{\alpha}{R}\eta_{1\gamma}\vec{v} - \frac{1}{R^3}\sum_{\gamma=1}^{N} \delta_{\gamma}\, m_{\gamma}\vec{\eta}_{3\gamma} \tag{5.15b}$$

Por último, el término del lado derecho de la ecuación es un término linealizado de colisión en una ecuación del tipo de la de Williams, el cual se puede interpretar como una aproximación del tipo Bhatnagar, Gross, Krook (1954) para las gotas, con un tiempo de relajamiento dado por:

$$\theta^{-1}(R,\vec{v},\{gas\}) = -\sum_{\gamma=1}^{N}(\eta_{1\gamma}-\eta_{2\gamma}) + \frac{\partial}{\partial R}\left(\alpha \sum_{\gamma=1}^{N}\eta_{1\gamma}\right) \tag{5.16}$$

entonces:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_k + \vec{v}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{x}}\mathcal{G}_k + \frac{\partial}{\partial R}\left[\dot{R}\varepsilon\mathcal{G}_k\right] + \vec{F}\varepsilon\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\mathcal{G}_k = -\Theta^{-1}\mathcal{G}_k \qquad (5.17)$$

es la ecuación cinética efectiva para las gotas y

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{F}_\gamma + \vec{c}_\gamma\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{x}}\mathcal{F}_\gamma + \vec{F}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\mathcal{F}_\gamma = \int \mathcal{G}_k\left[\mathcal{F}_\gamma(-\vec{c}_\gamma,\vec{x},t) - \mathcal{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)\right]g_{\gamma k}\,d\Gamma_{\gamma k}\,dR\,d\vec{v} +$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{N}\mathcal{J}_{\gamma\alpha}(\mathcal{F}_\gamma,\mathcal{F}_\alpha) \qquad (\gamma=1,\ldots,N) \qquad (5.18)$$

es la correspondiente para los gases.

Desde el punto de vista matemático la ecuación para las gotas ahora es lineal en la función de distribución, aunque continúa acoplada con las ecuaciones cinéticas de los gases, dicho acoplamiento se refleja a través de las cantidades dadas en las ecuaciones (5.11)-(5.13); que eventualmente podrían calcularse tomando una expresión conocida para la función de distribución de los gases. De esta manera la ecuación (5.14), sería una ecuación cerrada para la función de distribución de las gotas.

Conceptualmente esta simplificación nos ha llevado a que las expresiones para la rapidez de evaporación de una gota aislada y la fuerza externa se vean "vestidas" por la interacción con los gases. Estos efectos son de esperarse ya que aún cualitativamente podemos ver que las gotas son arrastradas por los gases y que su evaporación también depende de la interacción con el medio que las rodea. El tratamiento que aquí hemos desarrollado nos ha permitido encontrar una expresión cinética para dichas modificaciones.

5.2 Ecuaciones de Balance.

Para obtener las ecuaciones de balance del spray necesitamos una definición de las cantidades promediadas. Consideramos cualquier función $\Phi_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)$ de las variables de las especies del gas, este promedio viene dado por:

$$\{\Phi_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)\} = \frac{1}{n_\gamma}\int d\vec{c}_\gamma \mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)\Phi_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t) \qquad (5.19)$$

con

$$n_\gamma = \int d\vec{c}_\gamma \mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t) \qquad (5.20)$$

es la densidad numérica para la especie γ de la mezcla. Si deseamos obtener el promedio de alguna función de las variables de las gotas $\Phi_k(R,\vec{v},\vec{x},t)$, usaremos el promedio correspondiente;

$$< \Phi_k(R,\vec{v},\vec{x},t) > = \frac{1}{<N>}\int \mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)\Phi_k(R,\vec{v},\vec{x},t)d\vec{v} \qquad (5.21)$$

donde

$$< N > = \int \mathbb{G}_k(R,\vec{v},\vec{x},t)d\vec{v} \qquad (5.22)$$

es el número de gotas de radio R en el elemento de volumen $d\vec{x}$ al tiempo t. Cuando la cantidad que nos interesa no depende de los radios de las gotas, podemos también promediar sobre ellos, obteniendo las cantidades locales correspondientes, es decir:

$$\ll \Phi_k \gg = \frac{1}{\ll N \gg} \int G_k(R,\vec{v},\vec{x},t)\Phi_k(R,\vec{v},\vec{x},t)\,d\vec{v}dR \qquad (5.23)$$

donde
$$\ll N \gg = \int < N > dR \qquad (5.24)$$

es el número de gotas en $d\vec{x}$ al tiempo t.

La ecuación general de balance para las variables físicas asociadas con la componente γ de los gases se obtiene multiplicando la ecuación (5.18) por la correspondiente función $\Phi_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)$ e integrando sobre $\vec{c}_\gamma$, el resultado es:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_\gamma\{\Phi_\gamma\} + \nabla\circ\left[n_\gamma\{\Phi_\gamma\}\vec{u} + n_\gamma\{\vec{c}_\gamma\Phi_\gamma\}\right] - n_\gamma\left[\{\frac{\partial}{\partial t}\Phi_\gamma\} + \{\vec{c}_\gamma\circ\nabla\Phi_\gamma\} +\right.$$

$$\left. + \vec{F}\circ\{\nabla_{\vec{c}_\gamma}\Phi_\gamma\}\right] = \sum_{\alpha=1}\int\Phi_\gamma J_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{F}_\alpha)\,d\vec{c}_\gamma + \ll \mu_\gamma\Phi_\gamma \gg \qquad (5.25)$$

donde $\vec{u}$ es la velocidad hidrodinámica del sistema completo y está dada en términos de las velocidades $\vec{u}_\alpha$,

$$\vec{u} = \frac{n\vec{u}_a + \ll N \gg\ll \vec{v} \gg}{n + \ll N \gg} \qquad (5.26)$$

$$\vec{u}_a = \frac{1}{n}\sum_{\alpha=1}^{N} n_\alpha\vec{u}_\alpha \qquad (5.27)$$

$$\vec{u}_\alpha = \frac{1}{n_\alpha}\int \vec{c}_\alpha \vec{F}_\alpha(\vec{c}_\alpha,\vec{x},t)\,d\vec{c}_\alpha \qquad (5.28)$$

La cantidad μ_γ está dada por

$$\mu_\gamma(R,\vec{v},\langle gas\rangle) = \int[\mathbb{F}_\gamma(-\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)-\mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma,\vec{x},t)]g_{\gamma k}\,d\Gamma_{\gamma k} \qquad (5.29)$$

que depende de las variables de las gotas y de las propiedades de la mezcla.

Por otro lado, las ecuaciones generales de balance para cualquier función de las variables de las gotas está dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}[\langle N\rangle\langle\Phi_k\rangle] + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}\cdot[\langle N\rangle\langle\vec{v}\Phi_k\rangle] + \frac{\partial}{\partial R}[\langle N\rangle\langle\dot{R}\varepsilon\Phi_k\rangle] + \qquad (5.30)$$

$$-\langle N\rangle[\langle\frac{\partial}{\partial t}\Phi_k\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial \vec{x}}\cdot\vec{v}\Phi_k\rangle + \langle\dot{R}\varepsilon\frac{\partial}{\partial R}\Phi_k\rangle\langle\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\cdot\Phi_k\vec{F}\varepsilon\rangle] = -\langle N\rangle\langle\Theta^{-1}\Phi_k\rangle$$

Todas las variables en esta ecuación son funciones de $\vec{x}$, t y del radio R de las gotas.

5.3 Ecuaciones de Balance para la Mezcla de Gases.

En esta sección consideraremos algunos casos especiales para las ecuaciones de balance que escribimos en la sección anterior. Comenzamos con la ecuación de balance de masa y para obtenerla escogemos $\Phi_\gamma = m_\gamma$ y sustituimos en la ecuación (5.25). El resultado es el siguiente

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_\gamma + \nabla\cdot(\rho_\gamma \vec{u}_\gamma) = \sum_{\alpha=1}^{N'} \int m_\gamma \mathcal{J}_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma, \mathbb{F}_\alpha)\, d\vec{c}_\gamma + m_\gamma \ll \mu_\gamma \gg \qquad (5.31)$$

donde el símbolo $\sum_{\alpha=1}^{N'}$ quiere decir que el término $\gamma=\alpha$ está ausente y $\rho_\gamma = n_\gamma m_\gamma$. Este término se anula debido a la conservación de masa, momento y energía en la colisión molecular $\gamma-\gamma$.

$$\int \mathcal{J}_{\gamma\gamma}(\mathbb{F}_\gamma, \mathbb{F}_\gamma) \begin{bmatrix} m_\gamma \\ m_\gamma \vec{c}_\gamma \\ \frac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \end{bmatrix} d\vec{c}_\gamma = 0 \qquad (5.32)$$

La ecuación (5.31) es el análogo cinético de la ecuación (4.23), donde se tiene el balance de masa de las especies. La expresión cinética para la fuente de masa puede ahora identificarse como

$$\phi_\gamma^m = \sum_{\alpha=1}^{N'} \int m_\gamma \mathcal{J}_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma, \mathbb{F}_\alpha)\, d\vec{c}_\gamma + m_\gamma \ll \mu_\gamma \gg \qquad (5.33)$$

La ecuación (5.31) podría escribirse como una ecuación de balance para la concentración de especies, pero no la necesitamos explícitamente.

Para obtener la ecuación de balance de momento escogemos $\Phi_\gamma = m_\gamma \vec{c}_\gamma$ y la sustituimos en (5.25), entonces

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_\gamma \vec{u}_\gamma + \nabla\cdot\left[\rho_\gamma(\vec{u}_\gamma \vec{u} + \vec{u}\vec{u}_\gamma - \vec{u}\vec{u}) + \mathbb{P}_\gamma\right] = \rho_\gamma \vec{F} + \sum_{\alpha=1}^{N'} \int \mathcal{J}_{\gamma\alpha} m_\gamma \vec{c}_\gamma d\vec{c}_\gamma +$$

$$+ \ll m_\gamma \vec{c}_\gamma \mu_\gamma \gg \qquad (5.34)$$

donde $$\mathbb{P}_\gamma = \int m_\gamma \vec{c}_\gamma \vec{c}_\gamma \mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma, \vec{x}, t)\, d\vec{c}_\gamma \qquad (5.35)$$

es el tensor de presiones, que podría separarse en dos contribuciones, una proveniente de la presión hidrostática y una que corresponda al tensor viscoso.

La ecuación (5.34) es la análoga de la ecuación de balance de momento que se obtuvo en el capítulo anterior, (4.30), para ello definimos la velocidad relativa como en la ecuación (4.12) y entonces la comparación se puede llevar a cabo término a término. Ello permite identificar la expresión cinética de la fuente correspondiente.

$$-\vec{\phi}_\gamma^{\,P} = \sum_{\alpha=1}^{N} \int \mathbb{J}_{\gamma\alpha} m_\gamma \vec{c}_\gamma \, d\vec{c}_\gamma + \ll m_\gamma \vec{c}_\gamma \mu_\gamma \gg \qquad (5.36)$$

De manera similar obtenemos la ecuación de balance de energía, en ese caso $\Phi_\gamma = \frac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2$ es la energía total, porque suponemos que las moléculas no tienen grados de libertad internos. La variable macroscópica correspondiente a tal función está dada por

$$n_\gamma E_\gamma = \int \tfrac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma, \vec{x}, t)\, d\vec{c}_\gamma \qquad (5.37)$$

la ecuación de balance que obtenemos es la siguiente

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\gamma E_\gamma + \nabla \cdot \left[\rho_\gamma E_\gamma \vec{u} + \vec{q}_\gamma \right] = \sum_{\alpha=1}^{N} \int \tfrac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \mathbb{J}_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma, \mathbb{F}_\alpha)\, d\vec{c}_\gamma +$$

$$+ \ll \tfrac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \mu_\gamma \gg \qquad (5.38)$$

donde $$\vec{q}_\gamma = \int \tfrac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \vec{c}_\gamma \mathbb{F}_\gamma(\vec{c}_\gamma, \vec{x}, t) d\vec{c}_\gamma \qquad (5.39)$$

es el flujo de calor y los términos del lado derecho nos dan la fuente de energía correspondiente.

$$\phi_\gamma^E = \sum_{\alpha=1}^{N} \int \tfrac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 J_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma, \mathbb{F}_\alpha) d\vec{c}_\gamma + \ll \tfrac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \mu_\gamma \gg \qquad (5.40)$$

que se obtiene del segundo miembro de la ecuacion (5.38).

Todas las ecuaciones de balance que hemos construido en esta sección son similares a las que se obtienen en la teoría cinética de gases, para el caso de mezclas multicomponentes, pero tienen un término fuente adicional producto de la interacción con las gotas.

5.4 Ecuaciones de Balance para las Gotas.

Para estudiar el comportamiento de las gotas tomaremos algunos casos particulares de las ecuaciones de balance dadas en (5.30). Primeramente estamos interesados en el número de gotas en el elemento de volumen $d\vec{x}$ al tiempo t y con radios entre R y R + dR. Tal información es obtenida haciendo $\Phi_k = 1$ en la ecuación (5.30), dando como resultado la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle N\rangle + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}\left[\langle N\rangle\langle \vec{v}\rangle\right] = -\frac{\partial}{\partial R}\left[\langle N\rangle\langle \dot{R}\varepsilon\rangle\right] + \langle N\rangle\left[\left\langle \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \vec{F}\varepsilon\right\rangle - \langle \Theta^{-1}\rangle\right] . \qquad (5.41)$$

Vemos inmediatamente que el número de gotas no obedece a una ecuación de conservación, como podríamos esperar, existen cambios causados por la rapidez de evaporación efectiva, las fuerzas efectivas que actuan sobre las gotas y la relajación debida a la interacción con las moléculas del gas.

La ecuación de balance para la densidad de masa de las gotas, $\rho_k(R,\vec{x},t) = \frac{4}{3}\pi\rho_L R^3\langle N\rangle$, se obtiene haciendo $\Phi_k = \frac{4}{3}\pi\rho_L R^3$ en la ecuación (5.30), o bien multiplicando la ecuación (5.41) por Φ_k, ya que el promedio en velocidades no afecta a dicha función,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_k + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}\cdot\rho_k\langle\vec{v}\rangle = \rho_k\left[-\frac{\partial}{\partial R}\langle\dot{R}\varepsilon\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\cdot\vec{F}\varepsilon\rangle - \langle\Theta^{-1}\rangle\right] \qquad (5.42)$$

De acuerdo con las comparaciones efectuadas antes, ahora es claro que la ecuación (5.42) es la análoga de la (4.24) y la fuente de masa quedará expresada de la manera siguiente:

$$\phi_k^m = -\rho_k\left[-\frac{\partial}{\partial R}\langle\dot{R}\varepsilon\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\cdot\vec{F}\varepsilon\rangle - \langle\Theta^{-1}\rangle\right] \qquad (5.43)$$

Siguiendo con el esquema de las ecuaciones de balance, construimos ahora la ecuación de balance de momento haciendo $\Phi_k = \frac{4}{3}\pi\rho_L R^3\vec{v}$ y sustituyendo en la ecuación (5.30), eso nos da

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_k\langle\vec{v}\rangle\right] + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}\cdot\left[\rho_k(\vec{u}\langle\vec{v}\rangle+\langle\vec{v}\rangle\vec{u}-\langle\vec{v}\rangle\langle\vec{v}\rangle) + \rho_k\langle\dot{\vec{v}}\vec{v}\rangle\right] = -\text{grad}\left[\rho_k\langle\frac{v^2}{3}\rangle\right] +$$

(5.44)

$$+ \rho_k\vec{F}\varepsilon - \rho_k\langle\dot{\vec{v}}\dot{R}\varepsilon\rangle\frac{\partial}{\partial R}\ln\langle N\rangle + \rho_k\langle\vec{v}\left[\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\cdot\vec{F}\varepsilon\right]\rangle - \rho_k\langle\vec{v}\Theta^{-1}\rangle$$

donde $\vec{v} = \vec{v} - \vec{u}$ y $\dot{\vec{v}}\dot{\vec{v}}$ representa el tensor simétrico y sin traza $\vec{v}\vec{v}$. La ecuación (5.43) es similar a una ecuación de momento usual si interpretamos al tensor $\rho_k\langle\dot{\vec{v}}\dot{\vec{v}}\rangle$ como tensor viscoso y $\rho_k\langle v^2/3\rangle$ como la contribución a la presión hidrostática. Haciendo esto, observamos que ambos términos son en efecto la correlación de las velocidades de las gotas. Los últimos tres términos son las fuentes de momento causadas también por la evaporación, por la fuerza efectiva y la relajación respectivamente.

Una comparación directa con la ecuación (4.32) nos permite identificar la expresión cinética de la fuente de momento. .

$$\vec{\phi}_k^{\,P} = -\rho_k\langle\dot{\vec{v}}\dot{R}\varepsilon\rangle\frac{\partial}{\partial R}\mathcal{L}n\langle N\rangle + \rho_k\langle\dot{\vec{v}}\left[\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\circ\vec{F}\varepsilon\right]\rangle - \rho_k\langle\dot{\vec{v}}\Theta^{-1}\rangle \qquad (5.45)$$

De manera similar obtenemos la ecuación para la energía sustituyendo $\Phi_k = \frac{4}{3}\pi\rho_L R^3(v^2/2)$ en (5.30)

$$\frac{\partial}{\partial t}E_k + \frac{\partial}{\partial\vec{x}}\circ\left[E_k\langle\vec{v}\rangle + \vec{q}_k + \mathbb{P}_k\circ\langle\vec{v}\rangle\right] = \rho_k\langle\frac{v^2}{2}\dot{R}\varepsilon\rangle\frac{\partial}{\partial R}\mathcal{L}n\langle N\rangle +$$

$$+ \rho_k\langle\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\circ\frac{v^2}{2}\vec{F}\varepsilon\rangle + \rho_k\langle\frac{v^2}{2}\Theta^{-1}\rangle \qquad (5.46)$$

donde E_k es la energía total, $\vec{q}_k$ es el flujo de calor asociado a las gotas y $\mathbb{P}_k$ el tensor de presiones, que están dados por

$$E_k = \frac{1}{2}\rho_k\left[\langle\vec{v}\rangle^2 + \langle v^2\rangle\right] \qquad (5.47)$$

$$\vec{q}_k = \rho_k\langle\frac{v^2}{2}\vec{v}\rangle \qquad (5.48)$$

$$\mathbb{P}_k = \rho_k \langle \dot{\vec{v}}\dot{\vec{v}} \rangle + \rho_k \langle \frac{V^2}{3} \rangle \mathbb{I} \qquad (5.49)$$

El tensor de presión escrito aquí es el mismo que identificamos en la ecuación de momento (5.44), esto es, nos da la función de correlación de velocidad de las gotas. Nosotros lo escribimos en términos de las contribuciones de la parte simétrica y de la parte isotrópica, para compararlo con la presión y la parte viscosa respectivamente.

5.5 Comparación con la teoría Fenomenológica

De acuerdo con los resultados de las dos secciones anteriores, vemos que es posible establecer un parelelismo entre las ecuaciones de balance obtenidas cinéticamente con las correspondientes fenomenológicas del capítulo cuarto. Esto nos ha llevado a la identificación de varias cantidades hidrodinámicas como el flujo de calor, el tensor de presiones, etc.. No solo eso, sino que también hemos encontrado expresiones cinéticas para las fuentes de masa, momento y energía, tanto para los gases como para las gotas. Unicamente hace falta tener el análogo cinético de las ecuaciones que limitan a las fuentes. Puntulizando, recordemos que desde el punto de vista fenomenológico una de nuestras hipótesis es la conservación de la masa, momento y energía para el sistema completo, esto es, gases y gotas (sectores) y ello nos conduce a ecuaciones de restricción sobre las fuentes (4.20, 4.33 y 4.56). Ahora que tenemos expresiones cinéticas para las fuentes es natural es inmediato conocer la correspondiente restricción cinética.

Para el caso de las fuentes de masa sustituimos (5.33) y (5.42) en (4.20), con ello obtenemos

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\sum_{\alpha=1}^{N'}\int m_\gamma J_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{F}_\alpha)\,d\vec{c}_\gamma + \sum_{\gamma=1}^{N}\ll m_\gamma\mu_\gamma\gg +$$

$$+\int \rho_k\left[-\frac{\partial}{\partial R}<\dot{R}\varepsilon> + <\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\vec{F}\varepsilon> - <\Theta^{-1}>\right] dR = 0 \qquad (5.50)$$

El primer término de esta ecuación es idénticamente igual a cero debido a que la masa de las moléculas es invariante en la colisión $\gamma-\alpha$ y en efecto, las cantidades invariantes en colisiones satisfacen las ecuaciones siguientes:

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\sum_{\alpha=1}^{N'}\int\begin{bmatrix} m_\gamma \\ m_\gamma\vec{c}_\gamma \\ \frac{1}{2}m_\gamma c_\gamma^2\end{bmatrix} J_{\gamma\alpha}(\mathbb{F}_\gamma,\mathbb{F}_\alpha)\,d\vec{c}_\gamma = 0 \qquad (5.51)$$

El último término de (5.50) puede simplificarse usando (5.23) y entonces,

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\ll m_\gamma\mu_\gamma\gg + \ll N\gg\ll\rho_k\left[-\frac{\partial}{\partial R}<\dot{R}\varepsilon> + <\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\cdot\vec{F}\varepsilon> - <\Theta^{-1}>\right]\gg = 0 \qquad (5.52)$$

Para el caso del momento, sustituimos (5.36) y (5.44) en (4.33) y obtenemos:

$$\sum_{\gamma=1}^{N}\ll m_\gamma\mu_\gamma\vec{c}_\gamma\gg + \ll N\gg\ll\rho_k\left[-<\vec{v}\,\dot{R}\varepsilon>\frac{\partial}{\partial R}\mathcal{L}n<N> + <\vec{v}(\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\cdot\vec{F}\varepsilon)> +\right.$$

$$\left. - <\vec{v}\,\Theta^{-1}>\right]\gg = 0 \qquad (5.53)$$

De manera similar procedemos con las fuentes de energía. En este caso la restricción cinética resulta ser

$$\sum_{\gamma=1}^{N} \ll \frac{1}{2} m_\gamma c_\gamma^2 \mu_\gamma \gg + \ll N \gg \ll \rho_k \Big[< \frac{V^2}{2} \dot{R}\varepsilon > \frac{\partial}{\partial R} \mathcal{L}n < N > +$$

$$+ < \frac{\partial}{\partial \vec{V}} \cdot \frac{V^2}{2} \vec{F}\varepsilon > - < \frac{V^2}{2} \Theta^{-1} > \Big] \gg = 0 \qquad (5.54)$$

que se obtiene de sustituir (5.40) y el segundo miembro de (5.46) en (4.56).

Estas ecuaciones nos garantizan el cumplimiento de la conservación de masa, momento y energía para el sistema completo. Desde el punto de vista cinético, estas ecuaciones son condiciones que deben satisfacer las funciones de distribución tanto de los gases como de las gotas y deberán tomarse en cuenta cuando se intente obtener una solucón de ellas. En la teoría cinética existen diversos caminos para resolver ecuaciones cinéticas similares a la s que aquí se han obtenido pero esta labor se dejará para trabajos futuros.

5.6 Ecuaciones Cinéticas Vs Simulación

Una vez señalada la relación entre las ecuaciones de balance obtenidas cinéticamente con las ecuaciones fenomenológicas, nos interesa conocer la conexión de ambos enfoques con los resultados de la simulación descritos en el capítulo segundo. Para hacer clara esta comparación, recordaremos de manera muy somera aquellos aspectos que tienen especial relevancia en relación con lo desarrollado en este capitulo.

En la simulación se toman gotas aisladas sumergidas en un gas con características hidrodinámicas definidas, en donde las gotas se evaporan con rapidez dada por la ley conocida como "ley del diámetro cuadrado". Hasta ese momento no se ha tomado en cuenta los efectos que sufre la evaporación a consecuencia de la interacción con el gas, esto es, únicamente se toma en cuenta el término $\dot{R}$ de la

ecuación (5.15a). Por otra parte, la interacción de los gases se toma en cuenta únicamente a traves de la fuerza de arrastre, modelada como una fuerza de Stokes y con un coeficiente de arrastre efectivo, esta fuerza viene a jugar el papel de $\vec{F}_\varepsilon$ en la ecuación (5.15b).

Con estos ingredientes se efectuó el seguimiento de cada una de las gotas que forman el spray y mediante el módulo MedSat se ve cúal es la distribución de gotas para un elemento de volumen situado en $\vec{x}$ en un cierto instante. El resultado de esta intervención en el programa simulador es equivalente a obtener una fotografía del spray al tiempo t, de ese elemento de volumen.

Las gráficas de número de gotas, representadas por barras en los histogramas que se presenta al final del capítulo segundo, nos dan una visión pictórica de la función de distribución $G_k(R,\vec{v},\vec{x},t)$ y fotografías sucesivas nos dan su evolución. Debido a que el seguimiento de las gotas se efectúa con todo detalle, es claro que no solo se puede ver la evolución de la función de distribución, sino también de algunas propiedades promediadas que son de interés en el contexto hidrodinámico, como por ejemplo, la velocidad promedio de las gotas en función de su tamaño, la posición del elemento de volumen y del tiempo. Este cálculo esta representado gráficamente en los histogramas que ya hemos mencionado. De manera semejante se obtienen el momento y la energía cinética promedios de las gotas en función de su tamaño, de la posición de la celda y del tiempo.

Otro aspecto de este cálculo, es la obtención numérica de las fuentes de masa, momento y energía, que se obtienen simplemente "contando" las gotas que entran y salen del elemento de volumen en cuestión y tomando en cuenta la masa, momento y energía que llevan asociadas. Este cálculo se hace para cada sector y los resultados se presentan en el recuadro titulado: "datos de la celda" y que aparece adjunto a los histogramas del capítulo segundo.

Recordamos una vez más, que esos cálculos pueden hacerse para cada elemento de volumen y para cualquier instante. Con ellos se pueden hacer gráficas de número de gotas, velocidad promedio, etc., para cada sector a lo largo del spray. O bien, estando en un elemento de volumen, ver la evolución temporal de dichas propiedades. Esto puede verse en las figuras que se presentan a continuación:

Las matrices de interacción que describimos en la sección 2.7 contienen la informacion sobre los cálculos de número, masa, momento y energía de las gotas organizadas en sectores y elementos de volumen. El manejo de esta información nos permitirá evaluaciones numéricas de las derivadas con respecto a la posición $\vec{x}$ y al tamaño R de las cantidades promediadas, mismas que se identifican con derivadas de variables hidrodinámicas. Como ya se dijo antes, este trabajo esta en proceso.

Cabe señalar que lo descrito en esta sección puede realizarse numéricamente para otros modelos de evaporación y fuerzas de arrastre, que dejaremos para trabajos futuros. El estudio directo de la solución de las ecuaciones cinéticas para las funciones de distribución, así como, el estudio de la evaporación $\dot{R}_\varepsilon$ y la fuerza de arrastre $\vec{F}_\varepsilon$ efectivas, serán tratadas en un futuro.

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Hemos presentado el desarrollo de un modelo para el estudio de la evolución de un spray. Centramos el estudio en la termodinámica irreversible y nos apoyamos en en dos enfoques diferentes, a) una teoría cinética para entender todos los términos que aparecen en las ecuaciones de balance y que nos proporciona expresiones para calcularlas y b) una simulación numérica para obtener información sobre la hidrodinámica del sistema. Estos tres enfoques nos permiten una visualización muy clara del problema.

Un cuarto aspecto se añade a nuestro tratamiento, se trata de la cinética de combustión, que se aplica al combustible evaporado de las gotas, en localidades especificas del spray y con ello cerramos el tratamiento global de la combustión de sprays.

Para las aplicaciones especificas de nuestro tratamiento es menester plantear el problema y escribir las ecuaciones de balance a resolverse, tomando en cuenta por una parte, el número de especies presentes en la mezcla, y por otra, la cantidad de sectores en las que se subdivide el conjunto de tamaños de gotas en el spray. Posteriormente se requiere de un sistema potente de computación, capaz de resolver simultaneamente de menos 25 ó 30 ecuaciones de balance, que resultan ser ecuaciones en derivadas parciales. En este punto estamos en condiciones de probar métodos numéricos adecuados como los son elemento finitos o diferencias finitas, asi tambien como el método de Gear para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales con rigidez, tales como las que aparecen en la solución de los paquetes de reacción.

Un problema completo de combustión de sprays de hidrocarburos, que toma en cuenta las diecisiete especies químicas, que aparecen en la cinética básica de reacciones (capítulo tercero), requiere de un tiempo de cómputo muy grande, razón por estamos obligados a resolver por partes el problema. Como lo mencionamos en su oportunidad, estamos interesados en un futuro, y de hecho estamos en el camino, de implantar un programa simulador de flamas, que comtemple inclusive a los fenómenos de radiación, que en este problema estan ausentes. Tambien es necesario complementar este trabajo con fines de aplicacion a la combustión en hornos y calderas, sin embargo esto esta aún muy lejos de realizarse.

Los resultados de nuestro tratamiento son útiles para el cálculo de algunas propiedades del spray y para entender los detalles de los fenómenos que ocurren y las causas que los provocan. Una aplicación inmediata es la relacionada con la producción y el tranporte de calor y la producción de contaminantes dentro de una caldera, estos cálculos son de vital importancia en la industria

Este trabajo esta fuertemente asociado a tres programas de computación, ellos han sido elaborados completamente en la UAM-I, estan debidamente documentados y disponibles para su aplicación. Los programas a los que nos referimos son:

1).- **SAtom 1.4** Versión Terminada (Febrero de 1989) en lenguaje PASCAL (Borland), consta de dos módulos **SIMSAT** y **MEDSAT**, que hacen la simulación y la medicion de propiedades en sprays, respectivamente.

2).- **SComb 1.3** Versión Terminada (Marzo de 1989) en lenguaje FORTRAN (Microsoft 4.0), conta de dos partes **SPack** y **SGraf**, que resuelven respectivamente.el sistema sistema de

ecuaciones diferenciales, y nos presenta las gráficas correspondientes a la solución del problema.

3).- CMat 1.1 Versión inconclusa (Marzo 1989) en lenguaje PASCAL, se refiere al cálculo de las matrices de interacción que se estudian en el capítulo segundo. Este programa esta en su versión original y amerita algunos cambios para mejorar su eficiencia en tiempo de computación.

Estos programas son complementarios y requieren de la intervención humana para obtener de ellos el resultado requerido. Es deseable tener un programa "maestro" que sustituya la mano del hombre y que obtenga resultados de manera automática. Este es un buen trabajo para profesionales de la computación, pero aquí solo nos interesa los resultados hidrodinámicos de nuestro problema, aunque para ello tengamos que cubrir una cuota, correspondiente de tiempo de cómputo.

En el aspecto teórico, se abre una perspectiva de estudio en las integrales de colisión, aquí podemos proponer diversos modelos de interacción entre moléculas y gotas ó incluso, atacar el problema en presencia de colisión entre gotas. Este último problema es también parte de nuestro objetivo al futuro. Los modelos de evaporación, también pueden estudiarse mediante la teoria cinética que estamos proponiendo para el spray, aquí el campo que tenemos por delante es enorme.

La termodinámica irreversible que presentamos aquí, debe complementarse con un programa de computo que resuelva las ecuaciones de balance. Para este caso hemos iniciado la implementación de un programa de diferencias finitas mejorado por Patankar(1986), pero aún falta mucho trabajo en esa dirección. Al mismo respecto, nuestro programa SMat, en cierta medida nos ayuda a encontrar soluciones aproximadas a determinados problemas relacionados con la evolución del spray.

REFERENCIAS

Aggarwal S.K., Tong A.Y., Sirignano W.A.; "A Comparison of Vaporization Models in Spray Calculation" AIAA Journal 22(10),1448-1457(1984)

Agoston G.A.; Wise H.; Rosser W.A.; "Dynamic factors affecting the combustion of liquid spheres"; Sixth Symposium (international) on Combustion pp.708-716(1956)

Arbib H.A., Goldman Y., Greenberg J.B., Timnat Y.M.; "A Numerical Model of High Intensity Confined Hydrocarbon Combustion"; Combustion and Flame 38,259-270(1980)

Arpaci V.S., Selamet A.; "Entropy Production in flames"; Combustion and Flame 73,251-259(1988)

Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krok M.; "A Model for Collision Processes in Gases I. Small Amplitud Processes in Charged and Neutral One Component Systems"; Phys. Rev. 94,511-525(1970).

Billingsley J.; Kallend A.S.; Marsh A.R.W.; " A Chemical Kinetic Model to Predict Pollutant Levels in Combustion Exhaust" ; C.E.R.L. Note No RD/L/N121/73 (1973)

Bolt J.A.; Saad M.A.; "Combustion Rates of Freely Falling Fuel Drops in a Hot Atmosphere"; Sixth Symposium (international) on Combustion pp.717-725 (1956)

Bradley D., Kwa L.K., Lau A.K.C., Missaghi M.; "Laminar Flamelet Modeling of Recirculating Premixed Methane and Propane-Air Combustion"; Comb. and Flame 71,109-122(1988)

Chapman S., Cowlir T.G.; "The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases"; Third Ed. Cambridge Univ. Press (1970).

Chigier N.A.; Mc Greath C.G.; " Combustion of Droplets in Sprays"; Acta Astronautica 1,687-710(1974)

Chigier N.A.; "The Atomization and Burning Liquid Fuel Sprays" ; Progress Energy Combustion Science 2,97-114(1976)

Coffee T.P.; "Kinetic Mechanisms for Premixed Laminar Steady State Methane/Air Flames"; Comb. Flame 55,161-170 (1984)

Currie I.G.; "Fundamental Mechanics of Fluids" McGraw-Hill (1974)

Dagaut P., Cathonnet M., Boettner J.C., Gaillard F.; "Kinetic Modeling of Ethylene Oxidation"; Comb. Flame 71,295-312(1988)

Dasch C.J., Blint R.J.; "An Improved Spalding-Stephenson Procedure for one-dimensional Flame Calculations"; Combustion Science and Technology, 34,91-110(1983)

De Grot S.R., Mazur P.; "Non-Equilibrium Thermodynamics" North Holland (1962)

Dombrowski N.; "Biochemical and Biological Engineering Science"; Chap.16, Academic Press, New York (1968).

Driscoll J.F., Gulati A.; "Measurement of Various Terms in the Turbulent Kinetic Energy Balance within a Flame and Comparison with Theory"; Comb. and Flame 72, 131-152(1988)

Eisenklam P ; "atomization of Liquid Fuel for Combustion "; J. Inst. Fuel 34,130-143 (1961)

Eisenklam P.; Arunachalam S.A.; Weston J.A.; "Evaporation Rates and Drag Resistance of Burnig Drops";Eleventh Symposium (international) on Combustion pp.715-728(1967)

Faeth G.M.; "Current Status of Droplet and Liquid Combustion"; Proceeding of Energy Combustion Science 3,191-224(1977)

Faeth G.M.; "Evaporation and Combustion of Sprays"; Prog. Energy Combustion Science 9,1-76(1983)

Farias R.;"Modelación Cinético-Quimica de Productos de Combustión" Esc. de Ciencias Quimicas I.T.E.S.O. (Tesis) Guadalajara Jal.(1982)

Frazer R.P.; "Liquid Fuel Atomization"; Sixth Simposium (int) on combustion pp 687-700(1956)

Frazer R.P., Dombrowski N., Routley J.H.; "Performance Characteristics of Rotatory Cup Blast Atomizers " ; J. Inst. Fuel 36, 316-328 (1963)

Gardiner W.C. Jr. ; "Temperature Dependence of Bimolecular Gas Reaction Rates"; Acc. Chem. Res. 10,326-331(1977)

Gardiner W.C.; Olson D.B.; " Chemical Kinetics of High Temperature Combustion" Ann. Rev. Phys.Chem. 31,377-399(1980)

Gardiner W.C.Jr.; Editor: "Combustion Chemistry"; Springer Verlag, New York, (1984)

Godsave G.A.E.; " Studies of the Combustion of Drops in a Fuel Spray. The Burning of single Drops of Fuel"; Fourth Symposium (int) on Combustion pp.813-830(1953)

Gosman A.D.;Pun W.N.;Runchal A.K.;Spalding D.B.;Wolfshtein M.; "Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows" ;Academic Press London(1969)

Hall A.R. Diederischen J.; "An Experimental Study of the Burning of Single Drops of Fuel in Air at Pressure up to 20 Atmospheres" Fourth Symposium (int) on Combustion pp.837-846(1953)

Harris S.J., Weiner A.M., Blint R.J.; "Formation of Small

Aromatic Molecules in a Sooting Ethylene Flame"; Combustion and Flame, 72,91-109(1988)

Hedley A.B.; Nuruzzaman A.S.M.; Martin G.F.; "Combustion of single Droplets and Simplified Spray Systems"; J. Inst. Fuel 44,38-54(1971)

Hess C.F.; "Nonintrusive Optical Single-Particle Counter for Measuring the Size and Velocity of Droplets in a Spray"; Appl. Optics 23, 4375-4382 (1984)

Hindmarsh A.C.; "GEAR: Ordinary Differential Equation System Solver"; Lawrence Livermore Laboratory, Rept. UCID 30001 (1974) third revision, Univ. of California, Livermore CA, USA

Hubbard G.L.; Denny V.E.; Mills A.F.; "Droplet Evaporation: Effects of Transients and Variable Properties "; Int. J. Heat and Mass Transfer 18, 1003,1008 (1975)

Ingebo R.D.; "Atomization, Acceleration, and Vaporization of Liquid Fuels"; Sixth Symp. (int) on Combustion 684-687(1956)

Jachimowski C.A.; "Chemical Kinetic Reaction Mechanism for the Combustion of Propane"; Comb. and Flame 55,213-224(1984).

Jensen D.E., Jones G.A.; " Reaction Rate Coefficients for Flame Calculations"; Combustion and Flame 32,1-34(1978)

Jones W.P., Lindstedt R.P.; "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion"; Comb. and Flame 73,233-249(1988)

Kallend A.S.; Marsh A.R.W.; "The Solution of Coupled Rate Equations Arising From A Complex Chemical Reaction Scheme"; C.E.R.L. Note No. RD/L/N 123/73(1973)

Kerstein A.R.; "Prediction of the Concentration PDF for Evaporating Sprays"; Int. J. Heat Mass Transfer 27,1291-1309 (1984)

Kobayasi K.; " An Experimental Study on the Combustion of a Fuel Droplet" ; Fifth Symp. (int) on Comb. pp.141-148 (1955)

Krier H., Wronkiewicz J.A.; "Combustion of Single Drops of Fuel" Combustion and Flame 18,159-161(1972)

Kubo I.; "A Numerical Study of Confined, Turbulent Swirling Flow" ; Cornell University, Ph.D.Tesis (1974)

Labowski M.; "A Formalism for Calculating the Evaporation Rates of Rapidly Evaporating Interacting Particles"; Comb. Sci. and Techn. 18,145-151(1978)

Labowski M.; " Burning Rates of Linear Fuel Droplet Arrays" ASME 80-WA/HT-34 meeting july(1980)

Labowski M.; " Calculation of the Burning Rates o Interacting Fuel Droplets"; Combustion Science and Technolog, 22,217-220(1980)

Landau L.D.; Liftshitz E.M.; "Fluid Mechanics"; Adisson Wesley (1959)

Langmuir I.; " The Evaporation of Small Spheres " Physics Review 12(5),368-370(1918)

Launder B.E.; Spalding D.B.; "Mathematical Models of Turbulence"; Academic Press, London (1972)

Launder B.E.; Spalding D.B.; "The Numerical Computation of Turbulent Flows"; Computer Methods in Appl. Mech. and Eng. 3,269-289(1974)

Law C.K.; "A Theory For Monodisperse Spray Vaporization in Adiabatic and Isothermal Systems"; Int. J. Heat and Mass Transfer 18,1285-1292 (1975)

Law C.K.; "Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion"; Prog. Energy Comb. Sci. 8,171-201(1982)

Law C.K.; Law H.K.; "D^2-Law for Multicomponent Droplet Vaporization and combustion" ; AIAA J. 20,522-527(1982)

Lefebvre A.H.; " Airblast Atomization" ; Progress in Energy and Combustion Science 6, 233-261 (1980)
Masdin E.G. Thring M.W.; " Combustion of Single Droplets of liquid Fuel " ; J.Inst.Fuel 35,251-260 (1961)

Mugele R.A.; Evans H.D.; " Droplet Size Distribution in Sprays"; Ind. Eng. Chem. 43(6) 1317-1324(1951)

Nuruzzaman A.S.M.; "The Studies of Simplified Spray Combustion Systems " ; Fuel Soc. Journal, Univ. Sheffield 20,30-56 (1969)

Olson D.B., Gardiner W.C. Jr.; "An evaluation of Methane Combustion Mechanisms"; J. Phis. Chem. 81,2514-2519(1977)

Omemura A. Ogawa S. Oshima N.; "Analysis of the Interaction Between Two Burning Droplets"; Comb. and Flame 41,45-55(1981)

Omemura A. Ogawa S. Oshima N.; "Analysis of the Interaction Between Two Burning Fuel Droplets With Different Sizes"; Combustion and Flame 43, 111-119 (1981)

Oran E.S. Boris J.P.; "Numerical Simulation of Reactive Flow"; Elsevier Publishing Co. New York (1987)

Patankar S.V.; Spalding D.B.; " Heat and Mass Transfer in Boundary Layers, Second Ed., Intertext Books, London (1970)

Patankar S.V.;Spalding D.B.;"A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows" Int. Heat Mass Transfer 15, 1787-1806 (1972)

Patankar S.V.; Pollard A.; Singhal A.K.; Pratap V.S.;

"Numerical Prediction of Flow, Heat Transfer, Turbulence and Combustion" ; Pergamon Press,New York (1983)

Patnaik G.; Sirignano W.A.; "Axisymmetric Transient Calculation for Two Vaporizing Fuel Droplets"; Spring Technical Meeting Banff, Canada(1986)

Pratap S.V.; Spalding D.B.; "Fluid Flow and Heat Transfer in Three Dimensional Duct Flows"; Int. J. Heat Mass Transfer 19,1183-1188(1976)

Press W.H.; Flannery B.P.; Teukolsky S.A.; Vetterling W.T.; "Numerical Recipes" Cambridge(1986)

Raju M.S.; Sirignano W.A.; " Unsteady Navier-Stokes Solution For Two Interacting Vaporizing Droplets" AIAA-87-0300, Twenty-Fiveth Aerospace Sci. Meeting,Nevada (1987)

Saitoh T.;"Transient Combustion of a Fuel Droplet with Finite Rate of Chemical Reaction"; Comb. Sci. and Technology 22,227-234 (1980)

Saitoh T.; " Transient and Variable Property Analysis for Droplet Evaporation"; Technol. Rep. Tohoku Univ. 49,1-26(1984

Sha W.T., Soo S.L.; "Multidomain Multiphase Fluid Dynamics"; Int. J. Heat Mass Transfer 21,1581-1595(1978)

Sha W.T., Soo S.L.; "Addendum To Multidomain Multiphase Fluid Mechanics"; Int. J. Heat Mass Transfer 23,583-586(1980)

Simmons B., Williams A.; "A Shock Tube Investigation of the Rate of Soot Formation for Bencene,Toluene, and Toluene/n-Heptane Mixtures"; Comb. and Flame 71,219-232(1988)

Singhal A.K.; Spalding D.B.;"Predictions of Two-Dimensional Boundary Layers with Aid of the $k-\varepsilon$ Model of Turbunce"; Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 25, 365-383 (1981)

Sirignano W.A.; "Theory of Multicomponent Fuel Droplet Vaporization "; Archives of Thermodynamics and Combustion 9,231-247(1978)

Sirignano W.A.; "Fuel Droplet Vaporization and Spray Combustion" Progress in Energy and Combustion Science 9,291-322(1983)

Sirignano W.A.; "The Formulation of Spray Combustion Models: Resolution Compared to Droplet Spacing"
Trans. ASME, Journal of Heat Transfer 108,633-639(1986)

Soo S.L.; "Equation of Motion of a Solid Particle Suspended in Fluid"; Phys. Fluid 18(2),263-264(1975)

Soo S.L.: "Net Effect of Pressure Gradient on a Sphere";
Phys of Fluids 19(5),757-758(1976)

Spalding D.B.; " The Combustion of Liquid Fuels "; Fourth Symp. (int) on Combustion pp. 847-865 (1953)

Spalding D.B.; " A General Theory of Turbulent Combustion " ; J. Energy 2(1), 16-23 (1978)

Stokes G.G.; " On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums"; Trans. Camb. Phyl. Soc. 9,8-106(1851)

Tam C.K.W.; "The Drag on a Cloud of Spherical Particles in Low Reynolds Number Flow"; J.Fluid Mech.38(3),537-546(1969).

Tambour Y.; "Vaporization of Polidisperse Fuel Spray in a Laminar Boundary Layer Flow"; Comb.and Flame 58,103-114(1984)

Tambour Y.; "Simulation of Coalescence and Vaporization of Kerosene Fuel Sprays in a Turbulent Jet"; AIAA-85-1315(1985)

Tambour Y.; "A Lagrangian Sectional Approach for Simulating Droplet Size Distribution of Vaporizing Fuel Spray in a Turbulent Jet"; Combustion and Flame 60,15-28(1985)

Varela J.R.; "Cinética de Combustión para Hidrocarburos"; Reporte Interno Depto. IPH,UAM-I (1984).

Varela J.R.; " SAtom ; Un Programa FORTRAN para la Simulación de un Spray" ; Reporte Interno Depto. IPH,UAM-I(1984).

Varela J.R., Velasco R.M.; "Irreversible Thermodynamics for Spray Behavior";Aceptado en Revista Mexicana de Fisica (1989)

Varela J.R., Velasco R.M.; "Kinetic Equation for Spray Behavior"; Aceptado en Revista Mexicana de Fisica (1989)

Varela J.R., Garcia E.H.; " SAtom 1.4, Simulacion de Atomización" Depto. IPH. UAM-I (1989)

Vranos A., Liscinsky D.S.; "Pyroliysis of n-Tetradecane in Free Droplet Vaporization" Comb. Sci. Techn. 38,145-160(1984)

Warnatz J.;"The Mechanism of High Temperature Combustion of Propane and Butane"; Combustion Science and Technology 34,177-200(1983)

Westbrook C.K.; Creighton J.; Lund C.; Dryer F.L.; "Numerical Model of Chemical Kinetics of Combustion in a Turbulent Flow Reactor"; The J. of Phys. Chem. 81(25),2542-2554 (1977)

Westbrook C.A. "Three Dimensional Numerical Modeling of Liquid Fuel Sprays"; Sixteenth Symposium (int) on Combustion pp 1517-1526(1977)

Westbrook C.K.; " A Generalized ICE Method for Chemical Reactive Flows in Combustion Systems"; J. Comp. Sci. 29, 67-80 (1978)

Westbrook C.K., Pitz W.J., Thornton M.M.,Malte P.C.; "A Kinetic Modeling Study of n-Pentane Oxidation in a Well-Stirred Reactor" Combustion and Flame 72,45-62(1988)

Williams A.; "Combustion of Droplets of Liquid Fuels: A Review"; Combustion and Flame 21,1-31(1973)

Williams A. ; " Fundamentals of Oil Combustion " Progress in Energy and Combustion Science 2,167-179(1976)

Williams A. ; " Combustion of Sprays of Liquids Fuels"; Elek Science, London (1976)

Williams F.A.; "Combustion Theory"; First Edition, Addison Wesley, Reading MA. (1965), Second Edition, Benjamin Cummings, New York (1985)

APENDICE A
HISTORIA DE LA VIDA DE LAS GOTAS

En este apéndice presentamos la información experimental sobre la evaporación y el arrastre que sufren las gotas a causa de su interacción con el flujo gaseoso que acompaña al spray. Se trata en cierta manera de un complemento del capitulo segundo.

A.1 Datos sobre la Ley del Diámetro Cuadrado

Esta ley empírica se expresa según (2.1), donde la constante de evaporación λ tiene unidades de longitud al cuadrado dividido entre el tiempo $[L^2/t]$. En la figura A.1 se muestran algunos datos experimentales que validan el comportamiento empírico de la ley del diámetro cuadrado.

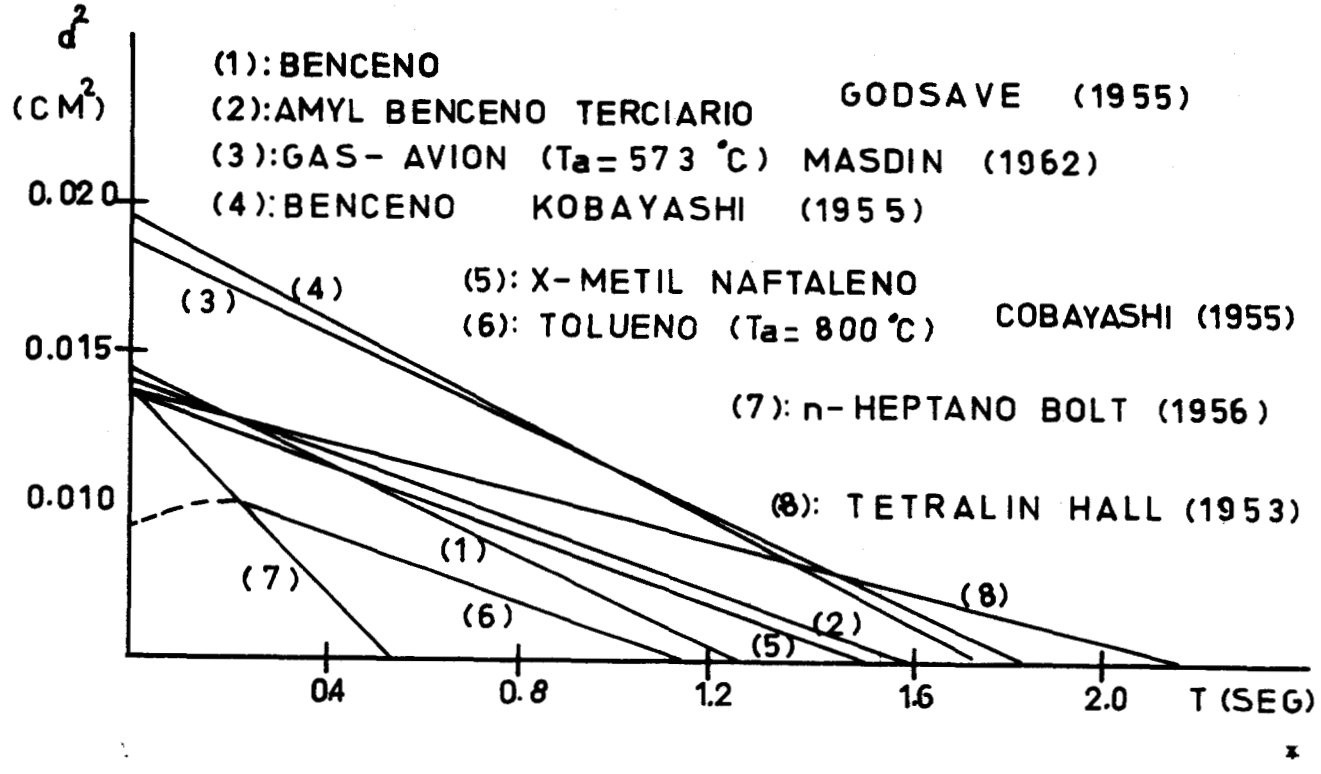


Fig. A.1 Dependencia del diametro cuadrado con respecto al tiempo en procesos de evaporacion de gotas. Hedley(1971)

En la figura A.2 se muestra la dependencia de λ con la temperatura T_A de la atmósfera, a la cual estan sometidas las gotas. De las ecuaciónes (2.2) y (2.3) resulta una dependencia directa de λ respecto a la temperatura. Puesto que esas ecuaciones han sido deducidas teoricamente entonces, los datos contenidos en la figura A.1, pueden ser utilizados para validar dichas ecuaciones.

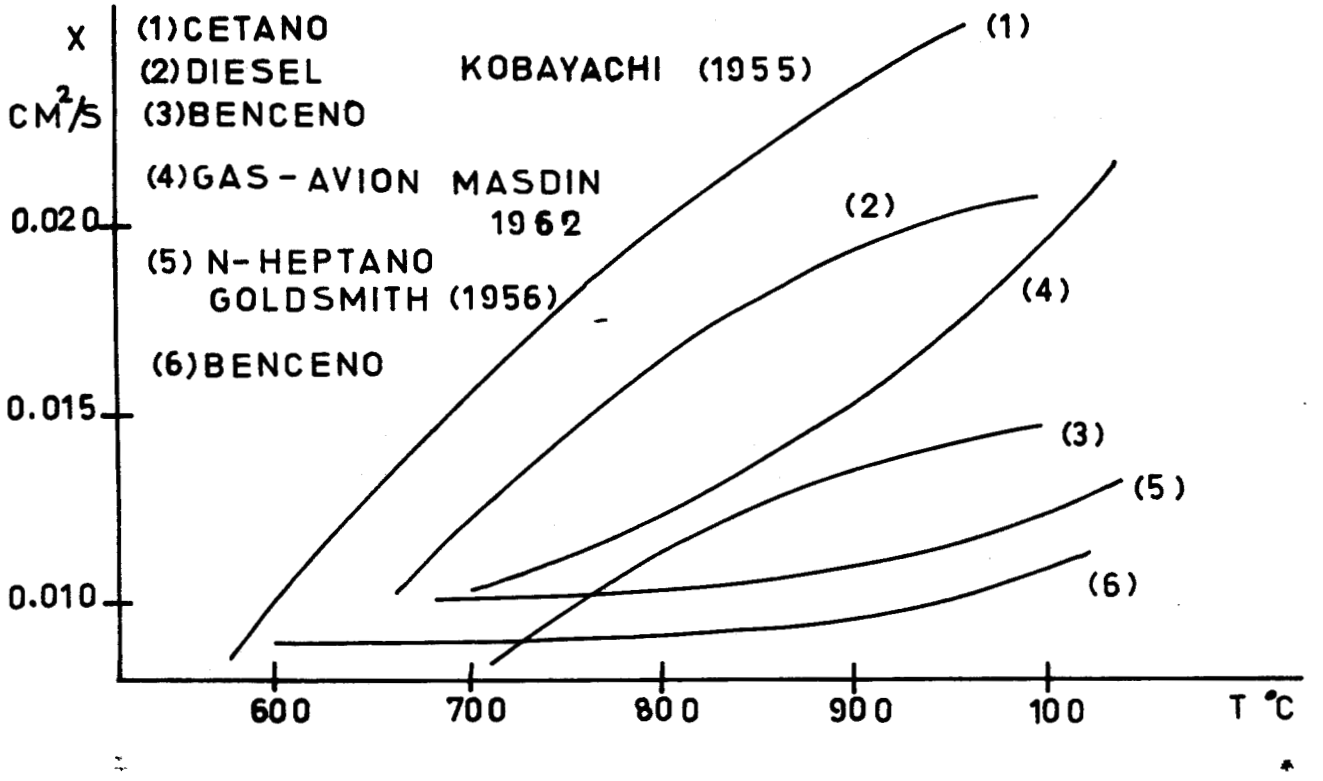


Fig A.2 Dependencia de λ con respecto a la temperatura Hedley(1971)

De las ecuaciones que nos describen la evaporación de las gotas en la sección 2.1, se deduce que la constante de evaporación λ no depende explicitamente de la presión, pero se intuye que esa dependencia es atraves de la ecuación de estado para los gases que rodean a la gota. Esta información se presenta en la figura A.2 y es especialmente útil en problemas relacionados con motores de combustión interna.

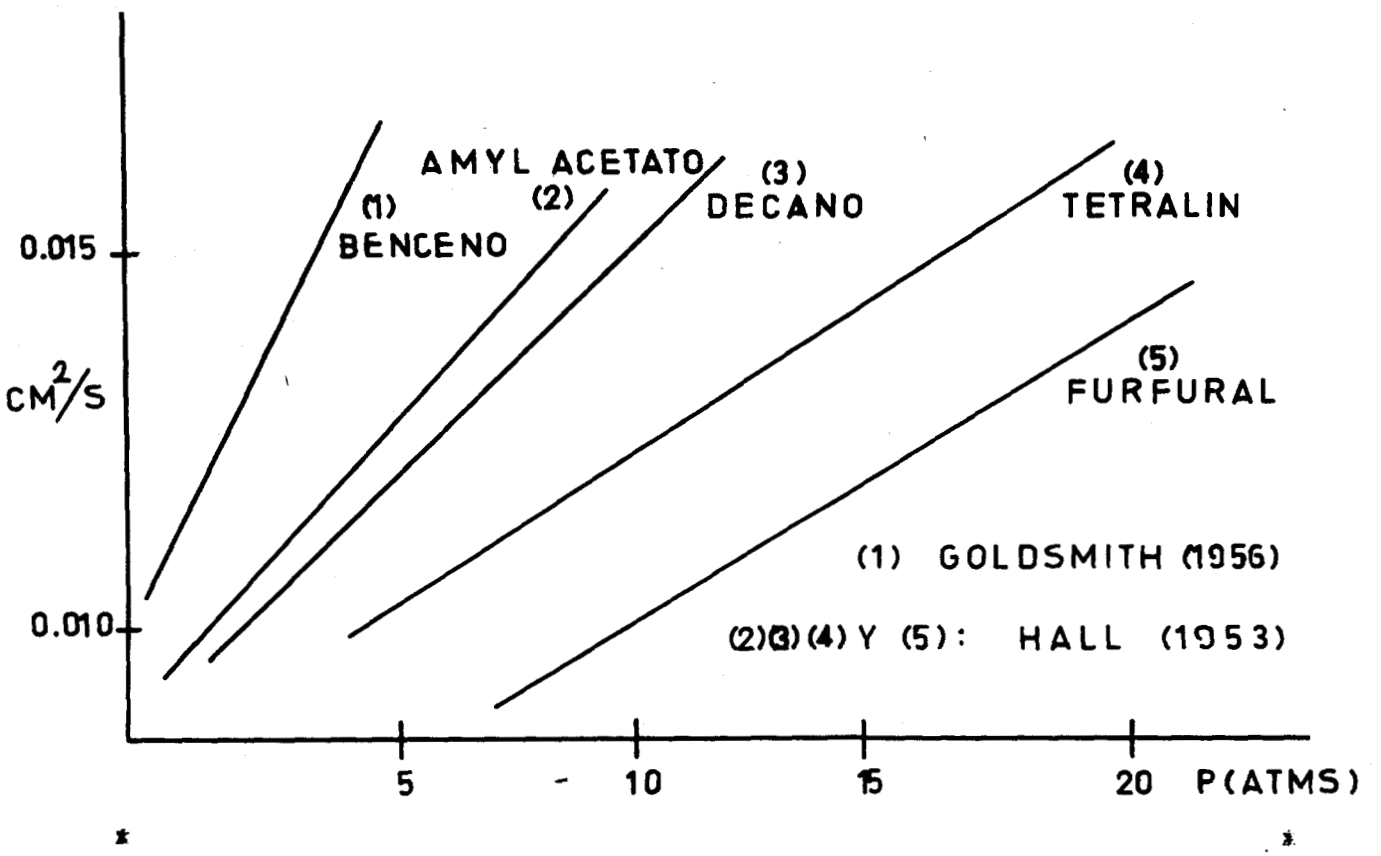


Fig. A.3 Dependencia de λ con la presión de los gases que rodean a la gota. Datos tomados de Hedley(1971).

Como se mencionó en el capitulo segundo, la constante de evaporación λ depende de la concentración de oxigeno en la atmósfera envolvente de la gota. Esta dependencia aparece explícitamente en la ecuación (2.3) que propone Spalding y que argumenta en base que el calor generado en la combustión acelera en cierta manera el proceso de la evaporación. En este caso, los datos experimentales que muestran la figura A.4, sirven también como base para validar las hipótesis empleadas en la ecuación (2.3). Cuando no hacemos intervenir la combustión, esto es, cuando solo estudiamos los efectos de la evaporación, entonces esta dependencia se minimiza, y es eliminada implícitamente de la ecuación, al anular el calor de reacción H que también entra como un factor multiplicativo.

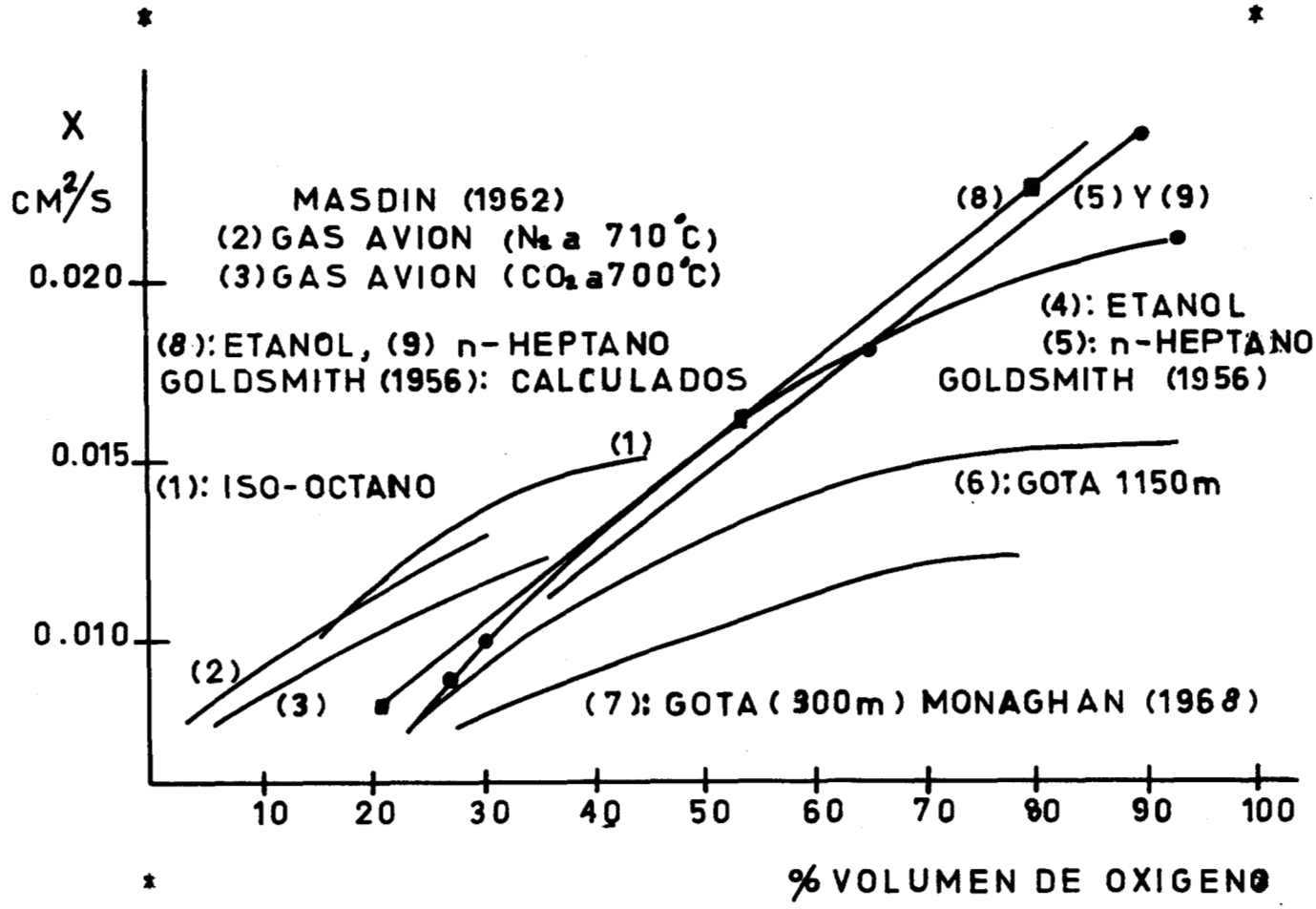


Fig. A.4 Dependencia de λ en función de la concentración de oxígeno en la atmósfera que rodea a la gota. Hedley(1971).

Como lo hemos repetido en varias ocaciones, los datos aquí presentados se refieren a la evaporación de gotas aisladas. Cuando dos ó más gotas separadas una cierta distancia se evaporan simultáneamente, entonces se presenta una interacción hidrodinámica entre las gotas que afecta mutuamente la evaporación de ambas ó de todas las gotas involucradas. El estudio de la interacción hidrodinámica entre gotas que se evaporan, es un tema de actualidad. Muchos investigadores téoricos se empeñan en proponer modelos, mientras que los experimentales hacen lo propio. De cualquier manera que se logre, es necesario y conveniente, disponer de relaciones que nos indiquen las correcciones que habrán de hacerse en casos de conglomerados de gotas en función de su separación libre media. A manera de ejemplo, mostramos en la figura A.5 resultados experimentales sobre esta problemática.

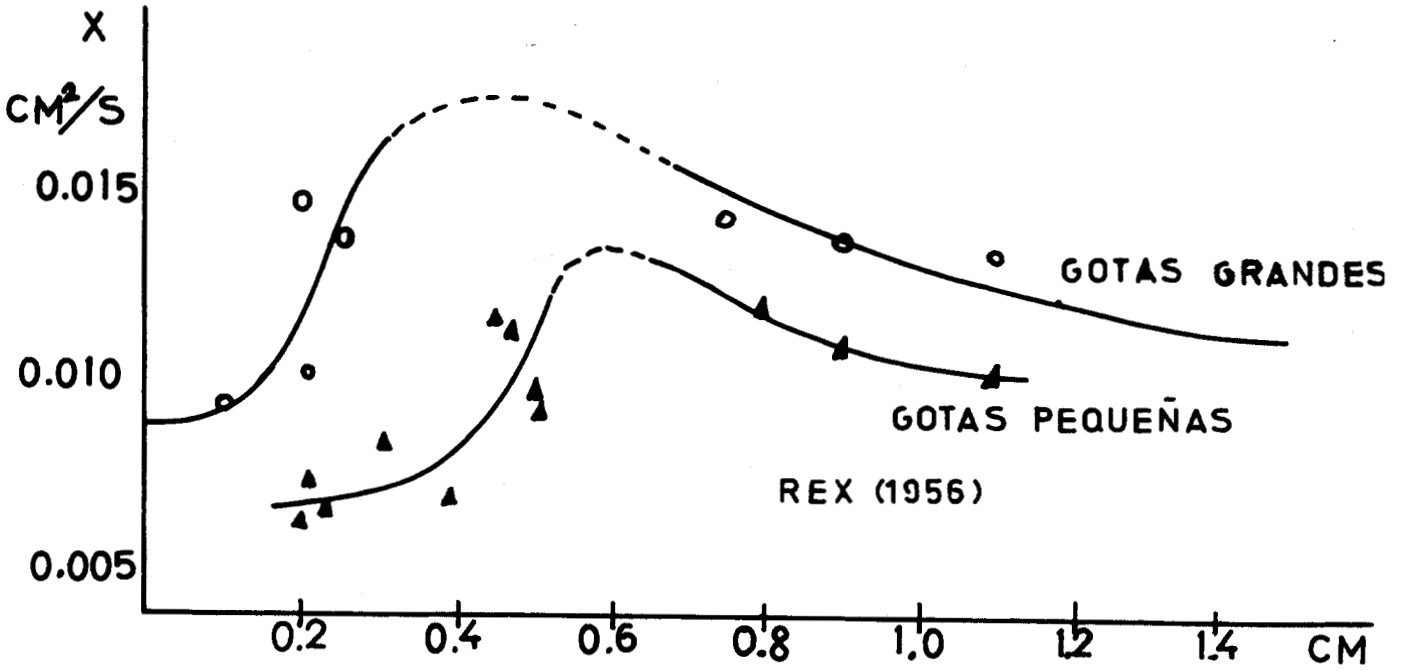


Fig A.5 Variación de λ para dos gotas que se evaporan y se afectan mutuamente, en función de la distancia que las separa

APENDICE B

MECANISMOS DE REACCION Y CALCULOS DE COMBUSTION

En este apéndice, nos proponemos describir los cálculos estequiométricos para la combustión de mezclas de hidrocarburos pesados y complejos como lo son, el diesel y el combustóleo. Después presentaremos las velocidades de reacción para los mecanismos propuestos.

B.1 Cálculos estequiométricos de combustión

Primeramente consideramos la combustión completa de una mezcla compleja de hidrocarburos, de la cual solo conocemos su composición por peso:

Carbon	C	84% peso
Hidrógeno	H	10% peso
Azufre	S	5% peso
Nitrógeno	N	1% peso

consideramos también que el oxigeno proveniente del aire es el encargado de oxidar a la mezcla y recordamos que la composición por mol del aire, es como sigue:

Nitrógeno	N_2	79% mol
Oxigeno	O_2	21% mol

en donde por simplicidad, hemos despreciado los gases raros como el neón, criptón, radón etc., cuya composición en el aire se miden en partes por millon (ppm). Nuestro siguiente

paso, es calcular la fórmula promedio del combustible en cuestión, que se obtiene directamente dividiendo la composición entre el peso molecular del elemento en cuestión. Así púes, por cada 100 gramos de combustible y según la tabla de composición, obtenemos 7 moles de carbón, 10 moles de hidrógeno atómico, (5/32) moles de azufre y (1/14) moles de nitrógeno atómico. Esto nos dá una fórmula que podemos escribir como sigue:

$$C_7\ H_{10}\ N_{1/14}\ S_{5/32}$$

en donde hemos usado caracteres grandes para evitar confusiones innecesarias con esa fórmula. El planteamiento de la reacción global es inmediato:

$$C_7H_{10}N_{1/14}S_{5/32} + \alpha\ O_2 \longrightarrow 7\ CO_2 + 5\ H_2O + 1/14\ NO + 5/32\ SO_2$$

en donde α es la cantidad de oxígeno necesario para oxidar los cien gramos de combustible, que para este caso adquiere un valor: $\alpha = 9.69$ moles. Esta cantidad corresponde a 310 gramos de oxígeno, que es acompañado de 46.1 moles de nitrógeno, correspondiente a 1292 gramos.

Nitrógeno	N_2	82% mol
Dióxido de carbono	CO_2	13% mol
Agua	H_2O	5% mol
Dióxido de Azufre	SO_2	0.3% mol
Oxidos de Nitrógeno	NO_x	0.1% mol

Queremos hacer notar que las concentraciones resultantes para los óxidos de azufre y nitrógeno son tan pequeñas que pueden compararse con los errores de precisión que se cometen en el

cálculo de las demás concentraciones de esa mezcla. Es claro que los cálculos estequiométricos solo son útiles para obtener una primera aproximación de la composición de las tres primeras especies presentadas en la tabla anterior.

Un cálculo semejante puede hacerse para el caso de una combustión incompleta, donde la oxidación termina en el monóxido de carbono y radicales hidroxilos. para este caso tenemos el mecanismo siguiente:

$$C_7H_{10}N_{1/14}S_{5/32} + \alpha' O_2 \longrightarrow 7\ CO + 10\ OH + 1/14\ NO + 5/32\ SO_2$$

en donde resulta $\alpha' = 8.69$,

B.2 Mecanismos de Reacción

Las velocidades de reacción para los mecanismos propuestos en el capítulo tercero, son del dominio común y aparecen citados en literatura especializada. Aquí los incluimos con la intención de completar la información que se requiere para el tratamiento de la cinética básica de nuestro problema. Estos datos los hemos tomado del artículo de Jensen(1978), pero existen otros autores como Gardiner(1984), que han publicado y revisado exhaustivamente la literatura.

TABLA B.1

Velocidades de Reacción y Constantes de Equilibrio
para la Cinética Básica de Oxidación
$k = A * T^{n} * EXP(E/T)$
$CM^{3}/MOLECULA/SEG$ ó $CM^{6}/MOLECULA^{2}/SEG$

	A	n	E	A	n	E
R.1	3.0 E-34	0	900	7.1 E-26	0	59580
R.2	1.0 E-29	-1	0	8.8 E-25	0	51610
R.3	3.0 E-30	-1	0	3.8 E-25	0	52650
R.4	5.0 E-10	0	500	1.2 E-31	1.6	113000
R.5	2.4 E-10	0	-8250	12.4 E+00	0	7530
R.6	3.0 E-14	0	-4480	2.26 E+00	0	-1040
R.7	1.3 E-10	0	-38000	4.6 E+00	0	-37900
R.8	1.1 E-14	1	-3150	4.7 E+00	0	16120

TABLA B.1

(continuación)

Velocidades de Reacción y Constantes de Equilibrio para la Cinética Básica de Oxidación

$k = A * T^n * EXP(E/T)$

$CM^3/MOLECULA/SEG$ ó $CM^6/MOLECULA^2/SEG$

	A	n	E	A	n	E
C.1	7.0 E-33	0	-2200	8.5 E+00	0	62470
C.2	2.0 E-33	0	-850	2.7 E-24	0	7100
C.3	4.2 E-12	0	-24000	0.12 E+00	0	2890
C.4	2.8 E-17	1.3	330	9.6 E-03	0	10860
C.5	2.5 E-10	0	-11900	0.09 E+00	0	31050
H.1	1.0 E-25	-2	0	8.9 E-26	0	60180
H.2	1.9 E-15	1.3	-1825	2.3 E-01	0	7530
H.3	1.0 E-11	0	-550	1.0 E-01	0	8570
H.4	4.0 E-10	0	-950	9.3 E+00	0	20180
H.5	4.0 E-11	0	-350	3.3 E-01	0	29200
H.6	1.0 E-12	0	-9400	2.2 E+00	0	27710
H.7	8.0 E-11	0	-500	7.5 E-01	0	28160
H.8	5.0 E-11	0	0	7.6 E-02	0	36730
N.1	5.0 E-32	0	300	3.1 E-25	0	24640
N.2	2.2 E-12	0	-32100	2.6 E-02	0	-19100
N.3	8.0 E-12	0	0	1.3 E+00	0	27900
N.4	6.0 E-11	0	0	3.1 E-01	0	35450
N.5	1.3 E-10	0	-76000	1.9 E+01	0	33200
S.1	6.0 E-10	0	500	1.7 E-32	0.2	42000
S.2	2.5 E-12	0	-488	2.5 E-24	0	20000
S.3	1.0 E-11	0	-13500	1.7 E-24	0	-46500