Revista Ingenio, 20(1), Enero-Diciembre 2023, pp. 46-52, ISSN 2011-642X - E-ISSN 2389-864X



Driginal Article

DOI: https://doi.org/10.22463/2011642X.3589

Simulación numérica de la producción de hollín en una llama laminar de difusión axisimétrica de propano

Numerical simulation of soot formation in a propane axisymmetric laminar diffusion flame

MSc. Adalberto Salazar Navarro¹

¹Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso Chile, Orcid: https://orcid.org/0000-0001-5257-3175, email:adalberto.salazar@sansano.usm.cl

Cómo citar: A. Salazar-Navarro, "Simulación numérica de la producción de hollín en una llama laminar de diffusion axisimétrica de propano", *Rev. Ingenio*, vol.20, n°1, pp. 46-52, 2023, doi: https://doi.org/10.22463/2011642X.3589

Fecha de recibido: 26 de julio de 2022 Fecha aprobación: 16 de diciembre de 2022

	RESUMEN		
Palabras claves:	En este trabajo se realiza el estudio computacional de la formación de hollín para una llama de propano. Estas simulaciones, se realizaron teniendo en cuenta el efecto del uso de parámetros como, la velocidad del fluio y el fluio masico por unidad de área, para		
Altura de llama, FDS,	la predicción de la formación de hollín. También se tienen en cuenta parámetros como la altura de llama y la temperatura. En el		
Formación de hollín,	presente artículo se utiliza la herramienta computacional Fire Dynamics Simulator (FDS) para observar el comportamiento de		
Temperatura de llama.	producción de hollín en una llama laminar de difusión de propano (C3H8). En particular, se comparan los resultados de este software con (a) datos experimentales presentados dentro de la literatura y (b) con las aproximaciones Large Eddy Simulation (LES) y Direct Numerical Simulation (DNS), las cuales se emplean para predecir parámetros como, la producción de hollín, altura de llama y la temperatura de llama alcanzada. Los resultados obtenidos muestran un buen comportamiento frente a los resultados experimentales.		
	ABSTRACT		
Key words:	A computational study of soot formation for a propane flame was conducted in this study using soot formation models. To evaluate the effect in the prediction of soot formation and parameters, such as the flame height and the maximum temperature the simulations		
Flame height, SDS,	were carried out using two different parameters, flow velocity and mass flow per unit area. In this work, the Fire Dynamics Simulator		
Soot formation, Flame temperature.	(FDS) computational tool was used to observe the behavior of soot production, in a propane (C3H8) diffusion laminar flame. For the validation process, the results were compared with experimental data found in the literature. Also, the results using the Large Eddy Simulation (LES) and Direct Numerical Simulation (DNS) approaches were evaluated to compare the results of soot production, flame high, and flame temperature. The results obtained show a good agreement with the measured data.		

1. Introducción

La producción de material particulado proveniente de la combustión en diferentes reactores termodinámicos de combustión interna es conocido como hollín. Este es uno de los temas de mayor interés para desarrolladores e investigadores en la rama de la combustión, pues la mayoría de este hollín está compuesto de carbono, el cuál puede ser sustancialmente dañino para el medio ambiente y perjudicial para la salud [1]. De esta manera, se han implementado normas estrictas a nivel mundial para el control de emisiones contaminantes, lo cual ha despertado el interés de profesionales trabajando en la rama de la combustión y abierto la posibilidad del desarrollo de nuevas y mejores técnicas para el control de la cantidad de hollín que se produce dentro de los procesos de combustión [2-4].

Para lograr este objetivo es necesario la implementación de diferentes modelos capaces de predecir el comportamiento de

la combustión de diferentes combustibles, además de poseer la habilidad de predecir con excelentes aproximaciones la producción de hollín [5-7]. Dentro de la literatura se pueden encontrar una variedad de modelos desarrollados para este fin [6-8]. La predicción de manera adecuada de la producción de hollín no solo es importante para el cumplimiento de normativas en el control de emisiones, los estudios mencionados anteriormente, presentan modelos los cuales cuentan con una excelente capacidad de predicción y son utilizados para el diseño de una alta gama de dispositivos, desde reactores hasta quemadores con el objetivo de mejorar la eficiencia térmica de los mismos. Se ha establecido entonces que los modelos de predicción deben ser precisos con respecto a los datos experimentales encontrados dentro de la literatura. Lo anterior, con el objetivo de emular el comportamiento real, esto se puede lograr con el uso de mecanismos de reacción diseñados para el proceso de oxidación de diferentes combustibles junto con el uso de

Correo electrónico: adalberto.salazar@sansano.usm.cl (Msc. Ing. Adalberto Salazar Navarro)

Contraction de la Universidad Francisco de Paula Santander Ocaña Artículo bajo la licencia CC BY-NC-ND (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0)

programas especializados en la fluidodinámica del proceso y obtener los mejores resultados [5, 7]. Este trabajo tiene como objetivo simular la combustión del propano utilizando el índice de Oxigeno (IO) en la mezcla, para poder predecir el comportamiento en la producción de hollín, así como la altura de la llama. Para ello, se realizan simulaciones para un IO de un 25% y se compara con los resultados experimentales obtenidos por [9] bajo el mismo IO. En la sección 2 se explica la configuración realizada para las simulaciones utilizando la herramienta computacional FDS del National Institute of Standards and Technology (NIST) [10-11], que utiliza modelos de dinámica computacional, este programa es utilizado en el estudio de transferencia de calor y producción de humo de incendios, resolviendo numéricamente una aproximación de las ecuaciones de Navier-Stokes, utilizando Large Eddy Simulation (LES) en donde las estructuras a grandes escalas son simuladas y las estructuras a pequeña escala son modeladas utilizando aproximaciones dentro de las ecuaciones, o Direct Numerical Simulation (DNS) en donde los términos son calculados directamente sin el uso de aproximaciones. En las simulaciones realizadas se utiliza una reacción química de un solo paso sencilla que se puede describir como F+s(O₂+N₂) \rightarrow (1+s)P, la cual esta descrita por los reactivos (combustible y oxidante) y los productos; dentro del programa se configura la concentración volumétrica para el oxidante.

2. Metodología

2.1 Condiciones del experimento

Dentro de la simulación se reproducen las condiciones en las que se realizaron los experimentos desarrollados por [9]. Para esto, se emula un quemador tubular concéntrico el cual está formado por un quemador con un tubo interno de 10.9mm de diámetro interno, por donde se alimenta el combustible, y un tubo externo de 100mm de diámetro por donde pasa el oxidante, este último es una mezcla de dos gases (O2 y N2) los cuales son inyectados a presión atmosférica de manera separada, para obtener diferentes índices de oxígeno se varia el flujo de N2, que va desde 75.2 slpm hasta 34.1 slpm y manteniendo un flujo de O2 constante en 20 slpm; el combustible es inyectado dentro del quemador a un flujo constante de 1.223 cc/s; ver esquema en la Figura 1.



Figura 1. Esquema del quemador

2.2 Configuración del modelo en FDS

Para realizar las simulaciones, dentro del programa se utiliza una simplificación a dos dimensiones en coordenadas cilíndricas. Esta simplificación permite realizar el estudio del comportamiento laminar de una llama de difusión. Para configurar el quemador dentro del programa se realizan cálculos para determinar las velocidades del flujo para el combustible y el oxidante. El resumen de los cálculos se muestra en la siguiente tabla

Tabla 1. Características de los fluj	os
--------------------------------------	----

Especie	C ₃ H ₈	$O_{2} + N_{2}$
Área de salida (m ²)	9.33E-05	7.85E-03
Flujo (slpm)	0.07398	80
Velocidad (m/s)	0.013	0.202
Flujo másico por área (kg/m2s)	0.012	0.102

Debido a las bajas velocidades con las que se trabajan, puede que las simulaciones muestren resultados menos precisos ya que el termino de difusión dominará el trasporte de masa [12], por esta razón se decide adicionalmente con el flujo másico por unidad de área de los gases, en lugar de la velocidad, ya que se puede llegar a errores dentro de la simulación.

Este comportamiento es verificado realizando dos simulaciones utilizando DNS, una configurada con la velocidad del flujo y otra utilizando el flujo másico por unidad de área. Los primeros resultados muestran que la simulación configurada con la velocidad no tiene un comportamiento estable de la llama como se observa en la Figura 2.

Estas simulaciones se realizaron con la finalidad de determinar la estabilidad en la llama, por lo que se crearon utilizando mallas gruesas y utilizando LES para un menor tiempo de cómputo. Teniendo en cuenta lo anterior, es posible realizar una mejor distribución del mallado, concentrando el mallado más fino en la zona de reacción.



Figura 2. Comparación del comportamiento de las llamas. Izquierda, utilizando velocidad. Derecha, utilizando flujo masico por área

2.3 Código desarrollado en FDS

En esta sección se muestra las líneas esenciales de la configuración dentro código de manera parcial utilizado para la simulación, en este no se muestra la configuración de la malla o la ubicación de las obstrucciones para brevedad dentro del documento, se decide correr las dos simulaciones simultaneas una definiendo dentro del código al flujo por su velocidad y otra por un flujo másico por unidad de área, como se menciona en las secciones anteriores.

Para las simulaciones en donde se define la velocidad en lugar del flujo másico, la línea de MASS_FLUX es reemplazada por VEL= -0.01310 para el propano y VEL=-0.202 para el oxidante en unidades de (m/s). Con esta configuración dentro del código es posible obtener una combustión del propano como se muestra en la Figura 2 lado derecho. Dentro del código se considera que, los alrededores se encuentra una configuración de aire del 21%.

2.4 Construcción de la malla

Para la contracción de la malla, el dominio computacional es dividido en 4 zonas como se muestra en la Figura 3, estas zonas permiten asignar la solución de esa malla a un procesador determinado, esto permitirá poder trabajar las mallas en paralelo y asignar un mayor número de procesadores a la zona de interés, que es la zona en donde se presenta la combustión. Debido a la capacidad computacional con la que se cuenta, dentro de este trabajo solo se estudiaran dos de las mallas, las cuales pertenecen a la Zona 1 y Zona 2 en donde se encuentra el quemador (recuadro amarillo), esto con el objetivo de crear una malla más fina en la zona de reacción y reducirá el tiempo de cómputo.



Figura 3. Distribución del mallado

Ya que las Zonas 3 y 4 solo cuentan con O_2 y no existe una interacción directa con el combustible, los resultados no se encuentran afectados por la configuración propuesta.

Tabla 2. Configuración del mallado

Zona	Configuración de malla	Medidas (m)	
		X	Z
1	100x1x100	[0-0.05]	[0-0.12]
2	100x1x50	[0-0.05]	[0.12-0.2]

2.5 Altura de llama

Para determinar el final de la combustión dentro de la simulación y poder determinar la altura de la llama, se utiliza una razón de oxidación de la mezcla que compara la cantidad volumétrica de oxígeno y combustible con al cual es posible determinar la zona de reacción y los límites de la llama. En [13] se propone utilizar una expresión que es capaz de calcular la cantidad de fracción de masa de oxígeno y de oxígeno necesaria para quemar la cantidad de combustible a cualquier punto, Ecuación 1.

$$Ro = \frac{m_o}{m_o + \sum_c s_c m_{F,c}} \tag{1}$$

Donde s= $n_o M_o/n_F M_F$, m es la fracción de masa del oxígeno, n es el numero de moles y M es el peso molecular. Los subíndices O y F corresponden al oxígeno y al combustible (fuel) respectivamente, y los subíndices c indican las especies presentes dentro del combustible. Esa razón tiene un valor R_o =1 cuando se encuentra en la entrada de aire o cuando la combustión se ha completado, y toma un valor de R_o =0 en la entrada de combustible [13]. Para las condiciones trabajadas dentro de esta investigación, la razón de oxidación para una combustión completa no se define como R_o =1, en su lugar se determina la razón de oxidación critica para poder definir dentro de la simulación los bordes de la llama, utilizando la siguiente expresión:

$$R_{cr} = \frac{1}{1 + \sum_{j} s_{j} \phi_{j}} \tag{2}$$

Donde \emptyset representa el límite de flamabilidad del combustible, que en el caso del propano según la literatura está determinado dentro de un rango del 2.1% y el 9.5% en porcentaje de concentración volumétrica de aire [14]. Dado que se requiere encontrar a que altura se completa la combustión, el límite inferior de flamabilidad es el utilizado dentro de la ecuación (2), esto permitirá definir el borde de la llama. Lo anterior entrega como resultado un R_cr=0.126 con lo cual se definen el final de la combustión y el borde de la llama dentro de las simulaciones realizadas.

3. Resultados

Los resultados obtenidos muestran que no es posible reproducir el comportamiento de la llama y la producción de hollín, esto se puede atribuir a las simplificaciones realizadas dentro de este estudio, como el uso de un mecanismo de oxidación para el combustible de 2 pasos y no un mecanismo de reacción detallado o simplificado, por lo que la cinética química de la reacción no se explica de una mejor manera, afectando de esta manera la predicción de los parámetros estudiados. Dentro del código utilizado se tomaron parámetros como la velocidad de flujo y el flujo masico para realizar las predicciones del final de la combustión utilizando la altura de llama h_S=0.07m y h_s=0.023m para las simulaciones utilizando la velocidad de flujo y el flujo masico respectivamente. El resultado de estas simulaciones se explica gráficamente en las siguientes secciones.

Dentro de los resultados también se logra observar que, las simulaciones son capaces de predecir la producción de hollín máxima para las condiciones dadas, pero no se logra predecir de buena manera la altura de llama. También, se evidencia que la producción máxima de hollín se da en radios diferentes, esto ocurre en los dos casos estudiados. A continuación, se presentan figuras comparativas que muestra los resultados obtenidos utilizando los parámetros anteriormente mencionados; velocidad de flujo y flujo masico por unidad de área.

Del análisis realizado, se observa la existencia de una distribución de temperatura similar para ambos casos. Las dos simulaciones utilizando diferentes parámetros para realizar las predicciones, son capaces de predecir con excelente precisión la temperatura máxima registrada dentro de los experimentos realizados, para el porcentaje de oxígeno utilizado.

Sin embargo, existe una diferencia notoria entre las alturas de llama predichas en cada caso, ver Figura 4. Las simulaciones presentan una distribución para la predicción de hollín similar y ambas alcanzan una producción máxima de hollín bajo las dos condiciones estudiadas.



Figura 4. Diferencia entre el uso de la velocidad (izquierda) y el flujo másico por unidad de área en una simulación DNS (derecha)

En ninguno de los casos simulados, se presenta una máxima producción de hollín o distribución de producción de hollín en relación con el radio del quemador, como se presentan en los resultados experimentales. Para las Figuras 5, 6, 8 y 9 los resultados experimentales son representados por líneas continuas y los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas se presentan con líneas discontinuas.

3.1 Simulación utilizando la velocidad de descarga

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al utilizar como parámetro de definición del flujo, (tanto de combustibles como del oxidante) la velocidad de descarga de los mimos. La Figura 5 muestra una comparación entre los resultados experimentales obtenidos por [9] y los resultados de este estudio.



Dentro de estos resultados, se observa una distribución de producción de hollín en relación con el radio del quemador diferente a los experimentales, lo anterior, debido que estos últimos la producción máxima de hollín se presenta en un radio aproximado de 2mm, mientras que, en las simulaciones realizadas, esta máxima producción de hollín se presenta en aproximadamente 5mm, cercano a la salida del combustible.

La Figura 6 muestra una comparación de los resultados en relación con el radio del quemador; en este se observa que, para un mismo radio, mientras que los experimentales muestran que la producción de hollín en estos puntos se mantiene relativamente constante al igual que su temperatura. En el caso de esta última (ver Figura 6), las simulaciones se acercan a las temperaturas registradas experimentalmente con una diferencia en promedio de 156 K.



Por último, la Figura 7 se muestra la distribución para la producción de hollín en relación con el radio, en esta figura se observa un comportamiento similar al que se presenta dentro de los resultados experimentales, pero en este caso ocurre a radios diferentes.



Figura 7. Producción de hollín y temperatura

3.2 Simulación utilizando flujo másico por unidad de área En esta sección se presentan los resultados obtenidos al utilizar como parámetro de definición el flujo másico por unidad de área tanto de combustible como del oxidante. Estos resultados presentan un comportamiento similar al obtenido con uso de la velocidad del flujo como parámetro. La diferencia que estos dos presentan se refleja en la altura de llama, donde para el flujo másico de área, presenta una menor altura de llama y temperaturas más bajas. Sin embargo, se puede notar una misma distribución que el en las secciones anteriores. La Figura 8 muestra que, para el mismo radio en comparación con la Figura 6, la producción de hollín es mucho menor y disminuye con una mayor pendiente.



Revista Ingenio, 20, n°1, Enero-Diciembre 2023, pp. 46-52, ISSN 2011-642X – E-ISSN 2389-864X

En la Figura 9 se evidencia el mismo comportamiento observado en el caso anterior como se muestra en la Figura 6 para el mismo radio que los resultados experimentales, la producción de hollín permanecen constante al igual que su temperatura, para un radio en un rango entre 0 y 3 mm, solo se observan pequeños cambios en sus magnitudes.

En la Figura 9, se muestra la distribución de la producción de hollín y su temperatura para una altura determinada, en este caso también se evidencia una distribución semejante a la experimental, pero en radio diferentes, como se muestra en la Figura 10.



Figura 10. Producción de hollín y temperatura

3.3 Comparación LES y DNS

Dentro de las simulaciones se realiza una comparación entre dos modelos, LES y DNS. Estos dos son capaces de predecir una producción máxima de hollín que coincide con los resultados experimentales, mas no con la propia distribución. Entre los dos modelos existe una diferencia entre las temperaturas obtenidas en promedio de 400K, siendo el modelo en LES es el que presenta temperaturas menores, ver Figura 11. Lo anterior, se debe a que para LES existe cierta indeterminación en cuanto al campo de temperaturas. Estas dos también presentan diferencias en cuanto al tiempo computacional de simulaciones donde DNS es el modelo que gasta más recursos computacionales debido a su método de resolución de ecuaciones. Las diferencias que presentan los resultados utilizando LES se pueden deber al tamaño de malla asignado, el cual puede no recolectar toda la información necesaria del campo de velocidades y temperaturas para predecir con mayor exactitud los resultados experimentales.



Figura 11. Comparación entre LES y DNS dentro de la simulación usando flujo masico por unidad de área

4. Conclusiones

Un análisis de los resultados obtenidos permite observar que al aumentar el tiempo de simulación y refinar la malla, la llama generada utilizando velocidad de flujo como parámetro de cálculo, llega a estabilizar en comparación con las simulaciones realizadas utilizando el flujo másico de los gases.

La diferencia que se presenta entre los resultados experimentales y los obtenidos numéricamente se debe a la reacción simple utilizada para las simulaciones, ya que solo se tiene en cuenta una reacción de un solo paso y no un mecanismo de reacción más detallado que permita predecir con mayor exactitud los resultados experimentales. Las simulaciones son capaces de predecir producción de hollín y las temperaturas máximas a un porcentaje de oxígeno dado. A pesar, de que no se producen los perfiles de producción de hollín y su temperatura con exactitud, se puede observar un perfil similar al encontrado experimentalmente dentro de los resultados de las simulaciones, como los que se observan en las Figuras 7 y 10 pero a un radio diferente. Para los casos estudiados, la simulación en donde se utiliza el parámetro de flujo másico por unidad de área presenta la altura de llama más cercana a la registrada experimentalmente, el caso donde se utiliza la velocidad como parámetro para definir el flujo realiza una sobreestimación de la altura de llama. La diferencia entre los resultados para los casos estudiados y los resultados experimentales no se atribuyen al mallado realizado, es decir al uso de una malla más fina. Lo anterior, debido a que el utilizar un mallado más fino esto no permitirá obtener mayor cantidad de puntos, pero las distribuciones de temperatura y producción de hollín permanecería igual. Cabe resaltar que el uso de una malla más fina, los resultados pueden mejorar los resultados obtenidos para el campo de temperaturas cuando se una LES.

5. Referencias

- A. J. Cardona-Vargas, C. Echeverri-Uribe, J. Zapata-López, J. Jaramillo-Álvarez, C. Arrieta-Gónzalez, y A. Amell-Arrieta, "Cálculo de propiedades de combustión y análisis de estabilidad de llama para el gas límite 65%CH4 + 35%H2", *Rev. Ingenio*, vol. 17, n.º 1, pp. 1–8, ene. 2020. Doi: https://doi.org/10.22463/2011642X.232.
- [2] H. A. Yepes-Tumay y A. Cardona-Vargas, "Influence of high ethane content on natural gas ignition", *Rev. Ingenio*, vol. 16, n.º 1, pp. 36–42, ene. 2019. Doi: https://doi.org/10.22463/2011642X.238.
- [3] R. Henríquez, R. Demarco, J. L. Consalvi, F. Liu, and A. Fuentes, "The oxygen index on soot production in propane diffusion flames," in Combustion Science and Technology, May 2014, vol. 186, no. 4–5, pp. 504–517. Doi: https://doi.org/1 0.1080/00102202.2014.883226.
- [4] K. T. Kang, J. Y. Hwang, S. H. Chung, and W. Lee, "Soot zone structure and sooting limit in diffusion flames: Comparison of counterflow and co-flow flames," *Combust. Flame*, vol. 109, no. 1–2, pp. 266–281, Apr. 1997. Doi: https://doi.org/10.1016/S0010-2180(96)00163-0.
- [5] Y. Zhang, H. Zhou, M. Xie, Q. Fang, and Y. Wei, "Modeling of soot formation in gas burner using reduced chemical kinetics coupled with CFD code," *Chinese J. Chem. Eng.*, vol. 18, no. 6, pp. 967–978, 2010. Doi: https://doi.org/10.1016/ S1004-9541(09)60155-5.
- [6] I. M. Kennedy, "Models of soot formation and oxidation," *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 23, no. 2, pp. 95–132, Jan. 1997. Doi: https://doi. org/10.1016/S0360-1285(97)00007-5.
- [7] K. M. Leung, R. P. Lindstedt, and W. P. Jones, "A simplified reaction mechanism for soot forma-

tion in nonpremixed flames," *Combust. Flame,* vol. 87, no. 3–4, pp. 289–305, 1991. Doi: https://doi.org/10.1016/0010-2180(91)90114-Q.

- [8] C. C. Lee, M. V. Tran, B. T. Tan, J. B. Ooi, C. T. Chong, and G. Scribano, "A numerical study on soot formation in methane-ethanol diffusion flames," *Fuel*, vol. 328, no. July, p. 125313, 2022. Doi: https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125313.
- [9] F. Escudero, A. Fuentes, J. L. Consalvi, F. Liu, and R. Demarco, "Unified behavior of soot production and radiative heat transfer in ethylene, propane and butane axisymmetric laminar diffusion flames at different oxygen indices," *Fuel*, vol. 183, pp. 668–679, Nov. 2016. Doi: https:// doi.org/10.1016/J.FUEL.2016.06.126.
- [10] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, and M. Vanella, "Sixth Edition Fire Dynamics Simulator User 's Guide (FDS)," Natl. Inst. Stand. Technol. Spec. Publ. 1019, vol. Sixth Edit, p. 434, 2022. Doi: http://dx.doi.org/10.6028/ NIST.SP.1019.
- [11] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, and M. Vanella, "Sixth Edition Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model," Natl. Inst. Stand. Technol. NIST Spec. Publ. 1018-1, vol. Sixth Edit, p. 207, 2022. Doi: http://dx.doi. org/10.6028/NIST.SP.1018.
- [12] K. B. McGrattan and G. P. Forney, "Fire dynamics simulator (version 4):," Gaithersburg, MD, 2004.
- [13] W. Yang and W. Blasiak, "Numerical simulation of properties of a LPG flame with high-temperature air," *Int. J. Therm. Sci.*, vol. 44, no. 10, pp. 973–985, Oct. 2005. Doi: https://doi. org/10.1016/j.ijthermalsci.2005.03.001
- [14] "ICSC 0319 PROPANO." [Online]. Available: http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_version=2&p_card_id=0319&p_lang=es