

Sistemas de Combustión

Dr. Ismael Herrera Revilla*

Dr. Hermilo Ramírez León†

Dah Ma. del Carmen Hernández Rendón‡

31 de marzo de 1995

Abstract

Durante la reunión del Grupo de Trabajo con la Industria, se presentó el problema que lleva el título del presente trabajo, en donde la cuestión fundamental a determinar es la distribución de la concentración en el tiempo y el espacio del SO_2 que es emitido como parte de las descargas hacia la atmósfera de una planta termoeléctrica. Para tal fin, se construyó un modelo en donde se consideraron los postulados de la mecánica de fluidos en especial para el caso en que las variables dependientes son aleatorias, y, en el caso de la dispersión atmosférica se optó por un modelo de tipo Euleriano. Para la solución del sistema de ecuaciones resultante se ha utilizado una aproximación de diferencias finitas centrales en el espacio y se está desarrollando un código de cómputo, en el cual todavía no se han considerado reacciones químicas.

*Líder de Grupo; Instituto de Geofísica, UNAM, FAX 6-22-41-36

†Instituto de Investigaciones Eléctricas; FAX (73) 18-98-54

‡Posgrado en Geofísica, UNAM tel. 6-22-41-35

Introducción

La contaminación atmosférica, fenómeno que afecta tanto a las grandes concentraciones urbanas como a aquellas zonas donde existen importantes fuentes emisoras ha aumentado considerablemente durante las últimas décadas debido al constante incremento de las fuentes antropogénicas así como a la creciente diversidad de compuestos que son emitidos en la producción industrial. Esto ha sido de especial interés en virtud de que los compuestos liberados pueden producir afecciones a la salud, o bien, pueden dañar de manera irreversible los ecosistemas naturales; por ello se ha creado una legislación ambiental que hoy día impone nuevas restricciones a las actividades productivas, principalmente a la producción industrial. Por lo anterior, la solución de problemas relativos a la contaminación atmosférica cada vez adquiere mayor importancia; y para lograrlo se requiere por una parte, del diseño de instrumentos que controlen tanto el tipo y la cantidad de emisiones; y por la otra del control de los procesos que remueven los contaminantes una vez que estos se depositan en la superficie.

Una de las herramientas con que se cuenta tanto para el análisis como para la predicción de la distribución de contaminantes en la atmósfera son los modelos matemáticos, los cuales podemos afirmar, están en una fase de desarrollo y discusión, debido principalmente a que en esta clase de situaciones se da la interacción compleja de procesos físicos y químicos en un medio que es por definición aleatorio.

Dentro de este contexto es que se presentó en el grupo de trabajo con la industria el problema denominado Sistemas de Combustión, el cual constituye un caso particular de un fenómeno de contaminación atmosférica.

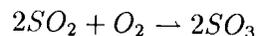
EL Problema

En este caso se pide la construcción de un modelo que permita determinar la distribución de concentración de dióxido de azufre (SO_2) en la atmósfera que es emitido por una central termoelectrónica, que se inscribe dentro de las consideradas principales fuentes emisoras de contaminantes.

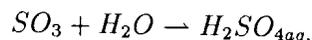
Ahora bien, una vez que los contaminantes llegan a la atmósfera, esta actúa como un medio para el transporte, la difusión y la transformación física y química de los mismos en donde se presenta el fenómeno conocido como efecto downwash que se produce cuando la emisión de contaminantes de las chimeneas de descarga

se hace en condiciones meteorológicas extremas, es decir, cuando existen gradientes de temperatura que combinados con la topografía de la zona provoca un fenómeno de recirculación local que hace que parte de los contaminantes se depositen inmediatamente y de forma violenta en lugar de ser transportados hasta una zona lejana. Debido a que la velocidad local varía en magnitud y dirección se produce una región de alta turbulencia, lo cual es el resultado de que el flujo se da en forma adyacente a una frontera sólida cuya rugosidad y temperatura son variables, eliminándose con esto la posibilidad de un flujo laminar, al flujo turbulento se le asocia el transporte de calor, vapor de agua y contaminantes; así como un nivel de mezclado eficiente.

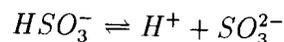
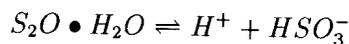
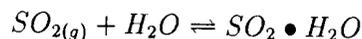
Por otra parte, está la transferencia de masa que es resultado de las reacciones químicas que pueden ocurrir cuando el SO_2 entra en contacto con la atmósfera. El SO_2 emitido tiene una tendencia a reaccionar con el O_2 atmosférico, produciéndose la siguiente reacción:



a su vez el SO_3 tiende a reaccionar con el agua para producir.



En la fase acuosa, se tienen las siguientes reacciones:



Cabe señalar que las reacciones en fase acuosa son catalizadas por O_3 , $Fe(III)$ y $Mn(II)$, principalmente.

1. Formulación de las ecuaciones básicas.

Tanto el flujo de aire como el transporte de masa en la atmósfera pueden considerarse como medios continuos, por tanto, para la formulación de las ecuaciones que describen ambos fenómenos se ha partido de los postulados de la mecánica de medios continuos, cuyas ecuaciones básicas se derivan de las ecuaciones generales de balance. Ahora bien, debido a que el campo de velocidades del aire va a afectar la distribución de los contaminantes en la atmósfera, iniciaremos con la descripción de las ecuaciones que gobiernan el flujo.

1.1. Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

en donde u_i es la i ésima componente de la velocidad y estamos suponiendo la suma sobre índices repetidos.

1.2. Ecuación de movimiento

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + g_i \quad (1.2)$$

ρ , μ y p , son respectivamente, la densidad, la viscosidad y la presión del fluido y:

$$g_i = g \frac{\tilde{T}}{T_0} \delta_{i3}$$

g es la aceleración de la gravedad, \tilde{T} es la variación de la temperatura debido al movimiento, T_0 es la temperatura de la superficie δ es la delta de Kronecker.

1.3. Ecuación de energía

$$\rho_0 C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = k \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + Q$$

ρ_0 es la densidad en la superficie y C_p , es la capacidad calorífica a presión constante

y Q , representa las fuentes internas de calor. Si se asume que $Q \equiv 0$, y que $K_T = \frac{k}{\rho_0 C_p}$, entonces la ecuación anterior se puede expresar como sigue:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = K_T \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} \quad (1.3)$$

Esta expresión resulta ser la ecuación del calor con parámetros constantes, por lo que a veces se le identifica como la ecuación de transferencia de calor.

Para la ecuación de difusión atmosférica, se tiene, tomando como base un modelo de tipo Euleriano, la siguiente ecuación de balance de masa:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + D_k \frac{\partial^2 C_k}{\partial x_i \partial x_i} + R_k(C_1, \dots, C) + S_k(\underline{x}, t) \quad (1.4)$$

en donde, C_k y D_k son respectivamente, la concentración y la difusión molecular de la k ésima especie; R_k es la generación de la k ésima especie por reacción química y S_k son las fuentes que aportan la k ésima especie.

2. La turbulencia

Las ecuaciones 1.1, 1.2, 1.3, y 1.4 gobiernan la velocidad del fluido, la transferencia de calor, la dispersión y la transferencia de masa, en la capa superficial de la atmósfera, sin embargo, su solución no es posible debido a que el flujo atmosférico es turbulento, en consecuencia, es irregular y aleatorio de tal forma que las componentes de la velocidad en cada punto, varían aleatoriamente con el tiempo; en suma, las ecuaciones anteriores resultan ser ecuaciones diferenciales parciales cuyas variables dependientes son aleatorias. Por ello, para que puedan representar de una manera más adecuada los procesos que son de nuestro interés, es necesario reformular éstas en términos de las cantidades medias. Así pues, puesto que ahora se trata de un modelo estocástico, cada variable se va a descomponer en su media más una componente fluctuante, es decir:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (2.1)$$

$$\theta = \bar{\theta} + \theta' \quad (2.2)$$

$$p = \bar{p} + p' \quad (2.3)$$

$$C_k = \bar{C}_k + C'_k \quad (2.4)$$

θ , es la temperatura potencial y se considera que $\frac{\partial T}{\partial x_i} \cong \frac{\partial \theta}{\partial x_i}$.

3. Ecuaciones para las cantidades medias

Sustituyendo en las ecuaciones 1.1, 1.2, 1.3 y 1.4 con estas relaciones y tomando en cuenta que $\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = 0$, nos queda lo siguiente:

3.1. Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.1)$$

3.2. Ecuación de movimiento

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + g_i - \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j} \quad (3.2)$$

ν es la viscosidad cinemática

3.3. Ecuación de energía

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = K_T \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \overline{u'_i \theta}}{\partial x_i} \quad (3.3)$$

3.4. Ecuación de conservación de especies

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{C}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{u}_i \bar{C}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{u'_i C'_k}) = \\ & = D_k \frac{\partial^2 \bar{C}_k}{\partial x_i \partial x_i} + R_k (\bar{C}_1 + C'_1, \dots, \bar{C}_n + C'_n) + S_k(\underline{x}, t) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Al reformular las ecuaciones de esta manera, podemos observar que se introdujeron nuevas variables adicionales, $u'_i u'_j$, $u'_i \theta'$, y $u'_i C'_k$ pero se mantuvo el mismo número de ecuaciones; y esto es lo que se conoce como el problema de cierre en fenómenos de turbulencia; en consecuencia, este sistema de ecuaciones (3.1-3.4), no tiene solución. Para resolver este problema se han propuesto varios modelos, que consisten en reemplazar las componentes fluctuantes ya definidas, por parámetros que pueden ser determinados experimentalmente. En este caso, para el cierre de las ecuaciones de continuidad, movimiento y de energía ó flujo de calor se ha utilizado un modelo $\kappa - \varepsilon$, mientras que para lograr el cierre de la ecuación de conservación de especies se recurrió a la teoría K.

4. Modelo de turbulencia de primer orden

El modelo $\kappa - \varepsilon$ se identifica por la forma en que se definen o se calculan los esfuerzos de Reynolds, es decir:

$$\overline{u'_i u'_j} = -\nu_T \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \quad (4.1)$$

donde, la viscosidad turbulenta ν_T se define como sigue:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (4.2)$$

la energía cinética, κ es obtenida por:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \overline{u}_i \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} = P + B - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right) \quad (4.3)$$

ε , la disipación de la energía cinética, se calcula mediante la siguiente relación:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = C_{\varepsilon 1} (P + B) - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) \quad (4.4)$$

En las últimas dos ecuaciones, P y B son respectivamente los términos de producción y de empuje quedan definidos de la siguiente manera:

$$P = \nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (4.5)$$

$$B = \frac{1}{T} g \frac{\nu_T}{P_{rt}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \quad (4.6)$$

P_{rt} , es el número de Prandtl.

Los valores para las constantes son los definidos por Rodi (1982) y son los siguientes:

$$C_{\varepsilon 1} = 1.44; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92; \quad C_{\mu} = 0.09; \quad \sigma_{\kappa} = 1; \quad \sigma_{\varepsilon} = 1.3$$

El flujo de calor es evaluado mediante:

$$\overline{u'_i \theta} = -K_T^* \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \quad (4.7)$$

en donde, el coeficiente de conductividad térmica, se define:

$$K_T^* = \frac{\nu_T}{P_{rt}} \quad (4.8)$$

Para la distribución de concentraciones, de acuerdo con la teoría K, se considera que la atmósfera es incompresible, es decir:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0$$

además:

$$\overline{u'_i C'_k} = -K_{ij} \frac{\partial \bar{C}_k}{\partial x_j} \quad (4.9)$$

en donde K_{ij} , es el tensor que expresa al coeficiente de conductividad turbulenta, si a éste se le hace coincidir con los ejes principales, entonces tendremos que:

$$\overline{u'_i C'_k} = -K_{ii} \frac{\partial \bar{C}_k}{\partial x_i}$$

Por otra parte, se puede demostrar que:

$$D_k \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x_i \partial x_i} \ll \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u'_i C'_k}$$

es decir, la difusión molecular es despreciable frente al término de difusión turbulenta. Otra consideración que se hace es el de que la componente fluctuante de la reacción es despreciable, esto es:

$$R_k (\bar{C}_1 + C'_1, \dots, \bar{C}_n + C'_n) \cong R_k (\bar{C}_1, \dots, \bar{C}_n)$$

y si se considera que no existen fuentes, entonces $S(\underline{x}, t) \equiv 0$, y la ecuación final quedaría de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \bar{C}_k}{\partial t} + \overline{u_i} \frac{\partial \bar{C}_k}{\partial x_i} = K_{ii} \frac{\partial \bar{C}_k}{\partial x_i} + R_k (C_1, \dots, C_n) \quad (4.10)$$

4.1. EL término de reacción

Para desarrollar esta sección, consideraremos una sola especie, el SO_2 , debido a que este compuesto al entrar en contacto con la atmósfera va a reaccionar y su concentración va a ir disminuyendo, es usual considerar que

$$R = -\lambda [C] \quad (4.11)$$

en donde $\lambda [C]$ la vamos a determinar por el tipo de reacciones que pueden ocurrir, así como por las constantes que la determinan; el signo negativo nos está indicando que durante el proceso, parte del SO_2 emitido se va a perder, es decir, se van a formar otras especies de azufre. En principio, consideraremos únicamente la reacción en fase acuosa, entonces tendremos que $C = SO_2 \bullet H_2O$; entonces:

$$\frac{d[SO_2 \bullet H_2O]}{dt} = -k [SO_2 \bullet H_2O]$$

En donde k , es la constante de velocidad de reacción. Si se supone que la reacción es de primer orden, al integrar la expresión anterior se obtiene:

$$[SO_2 \bullet H_2O] = [SO_2 \bullet H_2O]_0 e^{-kt}$$

El subíndice 0, indica la concentración inicial.

5. Solucion Numérica

EL problema se considero en dos dimensiones y, hasta el momento se ha resuelto el sistema de ecuaciones, sin considerar el término de reacción, se ha empleado un esquema de diferencias finitas centrales en el espacio para los términos de difusión y un esquema de peso para los términos de advección. La ecuación 3.1 se resolvió mediante una versión del método de compresibilidad artificial implícita (Peyret and Taylor). Por otra parte, la solución de problemas recirculantes requiere de una malla refinada, por lo que se está considerando una en progresión logarítmica en ambas direcciones. Estamos desarrollando un código llamado Quetzal/II (Ramírez,1991). Los cálculos numéricos se llevaron a cabo en una computadora CRAY Y-MP4/432.

Se ha aplicado el modelo a un flujo recirculante en donde las condiciones de salida de la chimenea son: $W = 5 \text{ m/s}$; $\Delta T_e = 20 \text{ K}$, $C_e = 15.02 \text{ g/m}^3$ de SO_2 , se está considerando un perfil de velocidades de viento logarítmico que sigue la ley:

$$u_v = u_{v10} \frac{\log\left(\frac{Z_l}{Z_0}\right)}{\log\left(\frac{H_{v10}}{Z_0}\right)}$$

Se estimaron las variables para un terreno urbano por lo que sus valores son $u_{v10} = 1 \text{ m/s}$; $H_{v10} = 10 \text{ m}$ y la rugosidad equivalente, $Z_0 = 0.5 \text{ m}$. Se asumió que los perfiles naturales de presión y temperatura tienen una variación vertical, entonces: $\nabla T_N = -0.018$ y $\nabla P_N = -11.40$.

Se han llevado a cabo pruebas preliminares para probar la constante de turbulencia que aparece en el modelo. Los números de Prandtl y Schmidt han sido optimizados a $P_{rt} = 0.5$ y $S_{cht} = 0.7$.

Bibliografía

Allen M.B., Herrera I. y Pinder, 1988; Numerical Modelling in Science and Engineering. John Wiley & Sons, New York.

De Moor G., 1983, Les Théories de la turbulence dans la couche limite atmosphérique; Ecole Nationale de Météorologie, Toulouse, Fr.

Donaldson C. Du P., 1973, Construction of a dynamic model of the production of atmospheric turbulence and dispersal of atmospheric pollutants. In Workshop on Micrometeorology, Haugen P. A. ed.; pp. 313-392, American Meteorological Society, Boston Ma.

Peyret, R. y Taylor, T.D., 1983; Computational methods for fluid flow, Springer-Verlag, USA.

Ramírez León H., 1994, El Programa Quetzal/II para el estudio de la dispersión de los contaminantes atmosféricos; VII Seminario IIE-IMP-ININ, Instituto Mexicano del Petróleo.

Rodi, W. 1982, Turbulent buoyant jets and plumes; HMT, the science and applications of heat and mass transfer, Vol. 6; Pergamon Press Ltd., Great Britain.

Seinfeld Jonh H., 1986, Atmospheric Chemistry and Physics of air Pollution, John Wiley & Sons, New York.

