

# Modelos para el estudio fenomenológico de la combustión sin llama con simulación numérica

## Numerical models for the phenomenological study of flameless combustion

Bernardo Argemiro Herrera Múnera<sup>1</sup>, Andrés Adolfo Amell Arrieta<sup>2</sup> y Francisco Javier Cadavid Sierra<sup>5</sup>

### RESUMEN

La combustión sin llama es una técnica que ofrece ventajas ambientales con emisiones de NO<sub>x</sub> y CO por debajo de 100 ppm debido a perfiles de temperatura con gradientes menores a 200 K y eficiencias energéticas mayores al 70%. El conocimiento de la fenomenología de este régimen de combustión ha sido facilitado por el empleo de la simulación numérica. En este artículo se ha hecho una revisión en la literatura especializada de los modelos de turbulencia, combustión, transferencia de calor y formación de NO<sub>x</sub> más usados en el modelado de la combustión sin llama con códigos CFD. Como resultado de la revisión se ha concluido que el modelo k-ε estándar es el más usado para la turbulencia, los modelos Finite Rate/Eddy Dissipation con sus constantes modificadas y Eddy Dissipation Concept son adecuados para las reacciones de combustión, el modelo de ordenadas discretas y suma ponderada de gases grises son utilizados para la radiación, y los modelos térmico, precoz y N<sub>2</sub>O intermedio se usan para los NO<sub>x</sub>.

**Palabras clave:** simulación numérica, CFD, combustión sin llama, turbulencia, radiación, NO<sub>x</sub>.

### ABSTRACT

Flameless combustion is a technique which offers environmental advantages such as lower than 100 ppm NO<sub>x</sub> and CO emissions due to below 200 K temperature gradients. Flameless combustion also supplies higher than 70% energy efficiency. Knowledge of the phenomena in this combustion regime has been facilitated by using numerical simulation. This paper reviewed the specialised literature about the most commonly used turbulence, combustion, heat transfer and NO<sub>x</sub> formation models in modelling flameless combustion with CFD codes. The review concluded that the k-ε standard model is the most used for turbulence. Finite rate/eddy dissipation with modified constants and eddy dissipation concept models are suitable for combustion reactions, discrete ordinates and weighted sum gray gas (WSGG) models are used for radiation and thermal, prompt and N<sub>2</sub>O intermediate models are used for NO<sub>x</sub>.

**Keywords:** numerical simulation, CFD, flameless combustion, turbulence, radiation, NO<sub>x</sub>.

Recibido: agosto 11 de 2008

Aceptado: junio 1 de 2009

### Introducción

Ante los diversos problemas ambientales que enfrenta la sociedad actual y la inminente escasez de las fuentes de combustible tradicionales en un tiempo no muy lejano, se ha generado un interés creciente en los investigadores y fabricantes de equipos por desarrollar técnicas y dispositivos de combustión que faciliten la reducción de emisiones contaminantes sin desfavorecer la eficiencia de los procesos de obtención y transformación de energía. Con referencia a esto último, la eficiencia térmica de los hornos industriales puede incrementarse significativamente con el precalentamiento del aire de combustión. Sin embargo, las emisiones de óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>) se incrementan significativamente con las altas temperaturas de combustión (Yang y Blasiak, 2005). Estos compuestos son regulados en muchos países con leyes restrictivas que son cada vez más estrictas (Galleti *et al.*, 2007).

En los últimos años se ha venido dando importancia a un método de combustión que emplea aire precalentado y fuerte recirculación de los productos de combustión. El precalentamiento del aire asegura una alta eficiencia térmica mientras que la dilución de la mezcla aire/combustible con productos de combustión genera una concentración de oxígeno menor a la que normalmente se utiliza en la combustión tradicional, lo cual reduce la temperatura de llama (Galleti *et al.*, 2007). Este régimen de combustión se ha denominado combustión sin llama, y según los resultados obtenidos por algunos investigadores, constituye una alternativa para solucionar el dilema entre eficiencia y reducción de emisiones (Wünning y Wünning, 1997) y una verdadera revolución en el diseño conceptual de hornos de alta temperatura (Cavaliere y Joannon, 2004; Delacroix, 2004; Wünning, 2003; Milani y Wünning, 2002c; Milani y Wünning, 2002d; Coelho y Peters, 2001; Gupta, 2000; Hasegawa y Tanaka, 1998; Wünning y Wünning, 1997).

<sup>1</sup> Ingeniero químico, Universidad Nacional de Colombia, Medellín. M.Sc., en Ingeniería, Universidad de Antioquia, Colombia. Auxiliar de investigación, Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Racional de la Energía, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Colombia. berherrer@gmail.com

<sup>2</sup> Ingeniero mecánico, Universidad de Antioquia, Colombia. M.Sc., en Economía de la Energía y los Recursos Naturales, Universidad Nacional de Colombia. Profesor, Ingeniería Mecánica y Coordinador, Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Racional de la Energía, Universidad de Antioquia, Colombia. Consejero Nacional, Programa de Investigación en Energía y Minería, Colciencias. anamell@udea.edu.co

<sup>3</sup> Ingeniero mecánico, Universidad de Antioquia, Colombia. Ph.D., en Ingeniería Mecánica y Energética, Université de Valenciennes et du Hainaut Cambrésis, Francia. Profesor, Ingeniería Mecánica e Investigador, Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Racional de la Energía, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Colombia. fcaavid@udea.edu.co

No obstante, la información acerca de esta técnica de combustión se encuentra dispersa (Cavaliere y Joannon, 2004) y las bases físico-químicas del fenómeno aún no están completamente entendidas. Este desconocimiento es más acentuado en países en vía de desarrollo como Colombia, donde ni siquiera se han consolidado capacidades científicas y tecnológicas para el dominio de los sistemas de combustión convencionales desarrollados en el siglo XX y mucho menos para seguir las nuevas tendencias en combustión (Amell y Cadavid, 2008). Una de tales tendencias es el uso de la simulación numérica para el estudio de la combustión, gracias a los avances en la informática. Más aún, existen modelos desarrollados para flujos reactivos turbulentos tan sofisticados que, junto con una fuente computacional, pueden generar una mejor comprensión y predicción de complicados procesos industriales por medio de simulación numérica (Dong, 2000).

En Colombia las investigaciones sobre los fenómenos y la aplicación tecnológica de la combustión sin llama se han iniciado desde el año 2006 con los proyectos financiados por Colciencias y ejecutados por el Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Racional de la Energía (Gasure), de la Universidad de Antioquia, para realizar desarrollos tecnológicos basados en este régimen de combustión. El objetivo principal de este trabajo, el cual es el resultado del estudio del estado del arte y de las simulaciones hechas para dichos proyectos, es dar a conocer los modelos numéricos más adecuados para ser usados en una herramienta de dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) que permitan hacer un estudio fenomenológico de la combustión sin llama. Para iniciar se hace una contextualización acerca de las características principales y las ventajas de la combustión sin llama, al igual que una breve descripción de los fundamentos de la simulación numérica de fenómenos fluido-dinámicos. Luego se muestra una revisión del estado del arte sobre los modelos de turbulencia, combustión, radiación y generación de NOx usados en la simulación numérica de la combustión sin llama, para finalmente concluir acerca de cuáles de estos modelos son los más adecuados.

## Características y ventajas de la combustión sin llama

En sistemas de combustión convencionales, los altos picos de temperatura ayudan a estabilizar la llama, pero son los principales responsables de la formación de óxidos de nitrógeno (NOx), causando además que la tasa de transferencia de calor no sea uniforme (Sassi, 2006; Wüning, 2003). Por otra parte, el mejoramiento de la eficiencia de los equipos de combustión es una de las claves para reducir el consumo de combustible y las emisiones de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en procesos de alta temperatura. En los últimos años, en los equipos de combustión se han implementado sistemas de recuperación de calor para precalentar el aire de combustión, consiguiéndose aumentos considerables en su eficiencia térmica (Rafidi y Blasiak, 2006; Delacroix, 2004; Wüning, 2003; Dong, 2000; Hasegawa y Tanaka, 1998; Suzukawa et al., 1997).

En 1989, en Alemania, se observó un fenómeno hasta ese momento desconocido. Con temperaturas del horno de más de 1.000 °C y precalentamiento de aire por encima de 650 °C, no se observó ninguna llama dentro del equipo, pero sin embargo el combustible fue completamente quemado y se midieron concentraciones de NO muy por debajo de las que se obtenían habitualmente. A esta nueva forma de combustión se le denominó combustión sin llama (Wüning, 2003). En la combustión sin llama la alimentación del oxidante y el combustible gaseoso se lleva a cabo separadamente con altas velocidades de inyección (Delacroix, 2004; Wüning y Wüning, 1997). Las reacciones toman lugar a tempe-

raturas por encima de la temperatura de autoignición del combustible en un gran volumen distribuido en el que el comburente y el combustible deben diluirse en una gran cantidad de gases inertes compuestos por N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> residual, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O.

La dilución del comburente es promovida por la alta recirculación de gases de combustión, la cual se logra si las condiciones aerodinámicas son apropiadas y la relación entre el *flux* de cantidad de movimiento del combustible y del aire está entre 0,005 y 0,08 (Sobiesiak et al., 1998). La alta recirculación implica una reducción sustancial de las temperaturas locales y sus fluctuaciones alcanzadas por la oxidación del combustible (Milani y Wüning, 2002b). Como resultado, no existe un frente de llama visible, y lo más significativo en términos ambientales es que las emisiones de CO y NOx son reducidas (Schütz et al., 2008; Yang y Blasiak, 2005; Delacroix, 2004; Wüning, 2003; Milani y Wüning, 2002a; Flamme, 2001; Hasegawa y Tanaka, 1998; Wüning y Wüning, 1997; Suzukawa et al., 1997). Otras ventajas incluyen la disminución en el riesgo de fallas locales en los materiales debidas a altos de flujo de calor por altos picos de temperatura y un *flux* de calor más uniforme que favorece la disminución del tamaño de los equipos industriales.

La combustión sin llama tiene asociados algunos sinónimos, tales como MILD (*Moderate and Intense Low Oxygen Dilution combustion*), HiTAC (*High Temperature Air Combustion* o DFI (*Fuel Direct Injection*)). No obstante, existen algunas diferencias conceptuales entre todos estos términos, las cuales pueden revisarse en el trabajo de Cavaliere y Joannon (Cavaliere y Joannon, 2004). Por otra parte, el aire precalentado no es una condición necesaria porque puede obtenerse combustión sin llama con aire a temperatura ambiente siempre y cuando se alcancen condiciones aerodinámicas óptimas en los flujos de aire y gas, para garantizar corrientes de recirculación en la zona de reacción que permitan obtener bajas concentraciones de O<sub>2</sub> (por debajo de 14%) en la mezcla de combustible, aire y gases de combustión, y también, que la temperatura en las paredes del horno sea un poco mayor que la temperatura de autoignición del combustible que se está utilizando (Masson, 2005).

La combustión sin llama no está limitada únicamente a combustibles fósiles gaseosos como el gas natural, sino que también puede ser aplicada a mezclas gaseosas pobres, tales como los gases recuperados de procesos industriales, lo mismo que a combustibles líquidos y sólidos. Ejemplos de estas aplicaciones pueden verse en los trabajos de Shimo de combustión sin llama de GLP y keroseno (Shimo, 2000) y de Weber et al. (2005) con carbón pulverizado. Por otra parte, la combustión sin llama ofrece la posibilidad de usarse en un amplio rango de aplicaciones que incluye hornos de calentamiento y tratamientos térmicos en la industria del acero, reformado de combustible, generación de potencia con turbinas de gas, quemadores de biogas, destrucción de basura, procesos químicos y generación de vapor (Ponzio et al., 2008; Delacroix, 2004; Wüning J. G., 2004; Tsuji et al., 2003; Wüning, 2003; Pozzoli et al., 2003; Kawai et al., 2002).

## Uso de la simulación CFD en sistemas de combustión

La combustión en fase gaseosa se desarrolla en medio de un conjunto de fenómenos físico-químicos que están fuertemente acoplados: la cinética, la difusión de calor y especies, movimientos convectivos inducidos por la turbulencia, y la termodinámica. Estos fenómenos pueden describirse por medio de ecuaciones derivadas de las leyes fundamentales de la conservación de la ma-

sa y la energía. Para ver más detalles sobre las ecuaciones derivadas de cada una de estas leyes, se recomienda consultar las referencias (Rendón, 2007; Poinso y Veynante, 2005; Hilbert *et ál.*, 2004; Candel *et ál.*, 1999). Las ecuaciones de conservación no pueden resolverse analíticamente, excepto en casos especiales simplificados. Además, la introducción de ecuaciones de turbulencia hacen aún más difícil una descripción detallada de la fluido-dinámica a partir de las ecuaciones de conservación.

La solución numérica de las ecuaciones de conservación ha sido un tema de creciente interés que ha ocupado la atención de casi un tercio de los investigadores de la mecánica de fluidos (Ferziger y Peric, 2002). Este campo de estudio se conoce como dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés), el cual no es más que el análisis de sistemas que involucran flujo de fluido, transferencia de calor y fenómenos asociados como las reacciones químicas por medio de simulaciones realizadas en equipos de cómputo (Versteeg y Malalasekera, 1995). Debido al alto costo de pruebas experimentales y prototipos, la simulación numérica se ha vuelto cada vez más importante para investigar la combustión en régimen turbulento (Hilbert *et ál.*, 2004; Patankar, 1980).

La simulación con *software* CFD ofrece ventajas como bajo costo con respecto a la experimentación física, velocidad en la elección de configuraciones de diseño óptimas, información completa y detallada de los fenómenos que ocurren en un determinado proceso, y facilidad de trabajar en condiciones reales e ideales. No obstante, la simulación CFD tiene algunas limitaciones, como por ejemplo la validez de los modelos para un fenómeno determinado, las geometrías complejas, la no linealidad de las ecuaciones, las variaciones de las propiedades de los fluidos, el tiempo computacional, entre otras.

## Descripción de los modelos numéricos para simulación de la combustión sin llama

Los códigos CFD pueden ayudar a optimizar el desempeño de los sistemas de combustión por medio de la investigación de los detalles geométricos, tales como la configuración de las boquillas de inyección y dispositivos para la recirculación interna de los gases (Galleti *et ál.*, 2007). Aun así, el éxito de una simulación para predecir los fenómenos físicos depende del buen conocimiento de los modelos que los códigos CFD emplean para manejar la turbulencia, la interacción entre la química y la turbulencia, la transferencia de calor, etc., para elegir cuál es el más adecuado de acuerdo con el conocimiento que se tenga de los fenómenos y con las experiencias que otros investigadores han tenido en el campo de la simulación y la experimentación. Entre las primeras simulaciones de combustión sin llama aparece el trabajo de Wüning y Wüning (1997). Estos autores encontraron excelente correspondencia entre los datos medidos y los datos calculados para el perfil de temperatura a lo largo de la cámara de combustión.

### Modelos de turbulencia

No existe un único modelo de turbulencia que sea aceptado universalmente. La elección de un modelo de turbulencia dependerá de consideraciones como las propiedades físicas del flujo, el nivel de precisión, la disponibilidad de la fuente computacional y el tiempo disponible para la simulación (Fluent Inc, 2005). Los modelos de turbulencia que se han usado para la simulación de la combustión sin llama son el *k-ε* estándar, *k-ε* RNG y *k-ε* *Realizable*

### Modelo *k-ε* estándar

Es muy popular por su robustez, bajo costo computacional y razonable precisión en un amplio rango de flujos turbulentos. Es un modelo semiempírico basado en las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta (*k*) y para su tasa de disipación (*ε*). Para la solución de las ecuaciones debe conocerse el valor de algunas constantes. Estas tienen los siguientes valores por defecto:  $C_{1\varepsilon} = 1,44$ ,  $C_{2\varepsilon} = 1,92$ ,  $C_{\mu} = 0,09$ ,  $\sigma_k = 1,0$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1,3$ . Se ha encontrado que estas constantes trabajan bien para un amplio rango de flujos libres y confinados (Fluent Inc, 2005).

Aunque los valores por defecto son ampliamente aceptados, la simulación de la combustión sin llama requiere algunos cambios en estos valores. Lupant *et ál.*, (2004) usaron el modelo *k-ε* estándar pero hicieron varias simulaciones reduciendo la constante  $C_{2\varepsilon}$  desde 1,92 a 1,8, mientras que Christo y Rally (Dally y Christo, 2005) ajustaron la constante  $C_{\varepsilon 1}$  en un valor de 1,6 en lugar del valor por defecto de 1,44 para predecir mejor el esparcimiento de los chorros redondos. Estas modificaciones introdujeron retardos en el inicio de la reacción. Por su parte, Dally *et ál.*, (2004) usaron el modelo *k-ε* estándar con todas las constantes por defecto, excepto  $C_{\varepsilon 1}$ , el cual fue fijado en 1,52 para tener en cuenta un ancho del chorro más bajo y más real del que reproduce el valor de 1,44.

No obstante, algunos investigadores reportan fallas del modelo *k-ε* estándar. Coelho *et ál.*, (2001) concluyeron que este modelo hace sobrepredicción de la tasa de esparcimiento de los chorros redondos y a esto atribuyen las discrepancias entre los datos numéricos y los experimentales de los campos de flujo. Ferrand (2003) comparó varios modelos de turbulencia, incluyendo el modelo *k-ε* estándar en la simulación de un horno de recocido con combustión sin llama y encontró que los modelos tuvieron buenas predicciones en lo concerniente al desarrollo de los chorros, aunque no muy buenos en las zonas de recirculación. Finalmente, eligió el modelo *k-ε* estándar debido al bajo costo computacional que este implica.

Otros autores, como Fleck *et ál.*, (2003) y Yang y Blasiak (Yang y Blasiak, 2005; Yang y Blasiak, 2006) han usado el modelo *k-ε* estándar en la combustión sin llama pero no dan mayores detalles sobre la influencia de estos resultados en la precisión de los resultados numéricos.

### Modelo *k-ε* *Realizable*

El modelo *k-ε* *Realizable* difiere del modelo *k-ε* estándar en el hecho de que contiene una fórmula distinta para la viscosidad turbulenta y para *ε* (tasa de disipación de la energía cinética turbulenta). El término *Realizable* quiere decir que el modelo satisface algunas restricciones matemáticas consistentes con la física de los flujos turbulentos. Este modelo predice con mayor precisión la tasa de esparcimiento de chorros redondos y planos. Las constantes del modelo son:  $C_{1\varepsilon} = 1,44$ ,  $C_{2\varepsilon} = 1,9$ ,  $\sigma_k = 1,0$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1,2$  (Fluent Inc., 2005).

El modelo *k-ε* *Realizable* requiere solo un poco más de tiempo computacional que el modelo *k-ε* estándar. Tabacco *et ál.*, (2002) emplearon el modelo de turbulencia *k-ε* *Realizable* por su mejor predicción de la tasa de esparcimiento de los chorros axisimétricos y por su buena adaptación con datos experimentales que los investigadores ya poseían. Por el contrario, Schütz *et ál.*, (2008) hallaron que el mezclado turbulento entre los chorros de alta velocidad de aire y combustible y los gases recirculados con el modelo *k-ε* *Realizable* no es descrito con buena precisión.

## Modelos de combustión e interacción química-turbulencia

En la combustión sin llama, los altos niveles de dilución y las temperaturas relativamente bajas provocan una disminución de las tasas de reacción, haciéndolas comparables con el fenómeno de mezclado turbulento, el cual es favorecido por la recirculación. Por lo tanto, el tratamiento de la interacción entre la turbulencia y la química es un punto crucial en el modelado de este régimen de combustión (Galleti *et ál.*, 2007).

Las características de la combustión sin llama pueden predecirse aproximadamente por medio de modelos de combustión estándar con mecanismos de un solo paso y modelos clásicos de turbulencia, modificando algunas de sus constantes para que sean capaces de expresar tasas de reacción precisas con temperaturas moderadas y atmósferas con baja presión parcial de oxígeno (Yang y Blasiak, 2006). Sin embargo, las predicciones de la estructura y composición química del chorro de combustible en un quemador de combustión sin llama no son por lo general satisfactorias. Con respecto a esto, Mancini *et ál.*, (2007) concluyen que las fallas de los diversos modelos para predecir dicha estructura es el resultado de un error en predicciones de la recirculación, el cual está asociado al modelo de turbulencia y no al de combustión.

Los modelos de combustión e interacción química-turbulencia más recientes, refinados y más usados en la simulación de la combustión sin llama, se reseñan a continuación.

### Modelo Eddy Dissipation

Este modelo se deriva del trabajo de Magnussen y Hjertager (1976) y se basa en el hecho de que la mayoría de los combustibles se queman rápidamente y la tasa global de reacción es controlada por el mezclado turbulento. En el modelo *Eddy Dissipation* la tasa neta de producción de cada especie está dada por el menor valor arrojado por dos expresiones en las cuales la tasa química de reacción está gobernada por la turbulencia. En otras palabras, la combustión procede dondequiera que exista turbulencia.

Una modificación al modelo *Eddy Dissipation* es el modelo *Finite Rate/Eddy Dissipation*, donde la tasa de reacción de Arrhenius y la tasa de reacción por turbulencia son calculadas. La tasa neta de reacción se toma como la menor entre estas dos tasas. El modelo *Eddy Dissipation* es limitado por el hecho de no predecir especies que sean controladas por la cinética, tales como los radicales. Para incorporar mecanismos de múltiples pasos en flujos turbulentos debe usarse el modelo *Eddy Dissipation Concept* (EDC) (Fluent Inc, 2005).

### Modelo Eddy Dissipation Concept (EDC)

El modelo EDC es una extensión del modelo *Eddy Dissipation* que incluye mecanismos químicos detallados en flujos turbulentos. Este modelo debe ser usado únicamente cuando no pueda suponerse que las reacciones químicas son rápidas (Fluent Inc, 2005), debido a su alto tiempo computacional. Cuando se selecciona el modelo EDC se tiene la opción de modificar la constante para la fracción volumétrica ( $C_{\xi}$ ) y la constante para la escala de tiempo ( $C_{\tau}$ ), aunque se recomiendan los valores por defecto ( $C_{\xi} = 2,1377$  y  $C_{\tau} = 0,4082$ ) (Fluent Inc, 2005). Yang y Blasiak (Yang y Blasiak (2005 y 2006) concluyeron que el modelo EDC con mecanismo de varios pasos es un modelo adecuado para simular la combustión en régimen HiTAC, especialmente cuando se aplica a hornos semi-industriales.

### Modelo PDF Mixture Fraction

La fracción de mezclado se define como la fracción local de masa de los elementos (C, H, etc.) quemados e inquemados en la corriente de combustible en todas las especies ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ , etc.). Bajo este principio, la combustión se simplifica a un problema de mezclado y se evitan las dificultades asociadas con las tasas de reacción no lineales, ya que la química puede modelarse por medio de ecuaciones que describen la relación instantánea entre la fracción de mezclado y la concentración de las especies, la densidad y la temperatura bajo la suposición del equilibrio químico. Sin embargo, la predicción de flujos reactivos turbulentos tiene que ver con la predicción de valores promedio de fluctuaciones, los cuales se relacionan con valores instantáneos por medio de un modelo de interacción entre la química y la turbulencia. Uno de tales modelos es la función de densidad de probabilidad (PDF, por sus siglas en inglés) (Fluent Inc, 2005).

Hasta el momento solo se han mencionado las características fundamentales de cada modelo de interacción química-turbulencia. Cada uno de ellos ha sido usado en trabajos de investigación que incluyen simulaciones de la combustión sin llama. Así por ejemplo, los modelos *Finite Rate/Eddy Dissipation* y *PDF Mixture Fraction*, se encuentran frecuentemente, pero varios autores difieren en cuál de los dos modelos es el más adecuado. Tabacco *et ál.*, (2002) simuló una cámara de combustión sin llama, aplicando los modelos *Finite Rate/Eddy Dissipation* y PDF, y obtuvieron buenos ajustes cualitativos de los datos experimentales, siendo el modelo *Finite Rate/Eddy Dissipation* el de mejor predicción de la temperatura axial para los casos en los que se tenían temperaturas de proceso bajas y moderadas ( $950\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $1.050\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) y el modelo PDF en el caso de temperatura más alta ( $1.150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Estos resultados sugieren que a temperaturas bajas y moderadas, la combustión sin llama es controlada más por la cinética que por el mezclado turbulento, prolongándose el tiempo de reacción y aplicándose en el caso en que el número de Damköhler (relación entre el tiempo químico y el tiempo físico) sea menor que 1. Por el contrario, a temperaturas más altas, el retardo de la ignición es reducido y el modelo PDF tiene una mejor predicción del campo global de la temperatura, debido a que tiene un mejor tratamiento de las fluctuaciones en flujos turbulentos donde la cinética no es controlante. Esto quiere decir que, a altas temperaturas, la cinética y el mezclado turbulento son fenómenos que se presentan simultáneamente y el número de Damköhler es aproximadamente 1. Esta conclusión también se puede ver en el trabajo de Schultz *et ál.*, (2008), Galleti *et ál.*, (2007) y Murer *et ál.*, (2004).

Otros autores sostienen que modelos como el PDF, que se basan en el equilibrio químico, no presentan buena predicción debido a que en la combustión sin llama el mezclado ocurre en condiciones de alta velocidad, lo cual origina que las reacciones químicas sean retrasadas por efectos de no equilibrio, aun en presencia de altas temperaturas (Schütz *et ál.*, 2008).

Lupant *et ál.* simuló un horno semiindustrial de combustión sin llama con varios modelos de combustión. Ellos encontraron que el modelo *Eddy Dissipation* sobreestima la temperatura de los gases de combustión cerca al quemador, mientras que el modelo *Finite Rate/Eddy Dissipation* presentó las mejores predicciones cuando se modificaron sus constantes A y B ( $A = 0,6$  y  $B = 1 \times 10^{20}$ ), y el modelo PDF mostró fuertes discrepancias con los resultados experimentales, principalmente porque supone una química muy rápida y en equilibrio. Yang y Blasiak (2006) y Christo y Dally (2005) tuvieron mejor predicción del volumen de la zona de reacción y la temperatura con el modelo *Finite Rate/Eddy Dissipation* al realizar

cambios en sus constantes para disminuir las tasas de reacción. Por su parte, el modelo PDF sobreestimó la temperatura y predijo un volumen de reacción más pequeño que el observado experimentalmente.

### Modelos de radiación

En la combustión sin llama, por ser un fenómeno volumétrico, la liberación de calor por radiación por unidad de volumen constituye un factor esencial para el desempeño del horno y la transferencia de calor. Algunos autores, como Weber *et al.* (1999 y 2005) y Pesenti *et al.* (2003) han constatado la liberación de calor uniforme de la combustión sin llama por medio de perfiles uniformes de radiación incidente sobre las paredes de la cámara de combustión. Por su parte, Rafidi *et al.* (2006) establecieron que el gran volumen de la combustión sin llama y la alta concentración de radicales y compuestos intermedios intensifican la radiación térmica, a pesar de los incrementos moderados de temperatura. Kawai *et al.*, (2002) sugieren la eliminación de zonas de convección para disminuir el tamaño de calderas que empleen la combustión sin llama porque la transferencia de calor para producir vapor se da mayoritariamente por radiación.

El problema de transferencia de calor por radiación dentro de un recinto de combustión es complejo, debido en primer lugar a la dificultad para resolver la ecuación de transferencia radiativa (ETR) en un campo tridimensional, y por otra parte, al cálculo de la contribución volumétrica del  $\text{CO}_2$  y el  $\text{H}_2\text{O}$  a la radiación. Los modelos más usados para el tratamiento de la radiación en la combustión sin llama son el *modelo de transferencia discreta de radiación (DTRM)* y el *modelo de ordenadas discretas (DO)*.

La principal suposición del DTRM es que la radiación que deja un elemento superficial se puede aproximar como un solo rayo. No obstante, el DTRM tiene alto costo computacional cuando hay muchas superficies desde donde se trazan rayos y existen muchos volúmenes cruzados por estos. Galleti *et al.* (2007) usaron el modelo DTRM para la simulación de la radiación en combustión sin llama con un número de rayos igual a 16, aunque ellos y otros autores como Yang y Blasiak (2006) y Coelho *et al.* (2001) no dan detalles sobre la influencia de este modelo en la precisión de los resultados para predecir la radiación incidente sobre las paredes.

Por su parte, el modelo DO permite resolver problemas que van desde radiación superficie-a-superficie hasta radiación que participa en problemas de combustión. Tabacco *et al.* (2002) eligieron este modelo argumentando que posee buena flexibilidad y mejor desempeño en la predicción con dominios complejos y multidimensionales. Por su parte, Lupant *et al.* y Coelho *et al.* (Coelho y Peters, 2001) usaron el modelo DO pero no ofrecen mayores detalles sobre su desempeño en términos de precisión y costo computacional.

Aparte del modelo de radiación, es importante reconocer que los gases pueden absorber o emitir energía. En la combustión del gas natural, las especies que participan de la radiación son el vapor de agua y el  $\text{CO}_2$ , principalmente. Por debajo de la temperatura de disociación, dichos productos de combustión emiten y adsorben radiación. Estos efectos dificultan el cálculo de transferencia por radiación (Ferrand, 2003). Afortunadamente existen modelos que permiten calcular las propiedades radiantes de los productos de combustión, tales como el modelo de suma ponderada de gases grises (WSGGM, por sus siglas en inglés). En este modelo se reemplaza la mezcla gaseosa por un cierto número de gases, de tal manera que el intercambio de radiación es calculado separadamente para cada gas y el *flux* total se obtiene al sumar el *flux* de cada u-

no, ponderado por factores. La precisión del método reside en la elección de los coeficientes de ponderación. En la literatura se encuentra un amplio uso del modelo WSGG para el cálculo del coeficiente de absorción, aunque ninguna publicación hace referencia a la utilidad que este modelo representa en la simulación de la combustión sin llama. Algunos autores que han usado el modelo WSGG son Tabacco *et al.* (2002), Lupant *et al.*, Galleti *et al.* (2007) y Ferrand (2003).

### Modelos de formación de NOx

Los NOx son contaminantes emitidos a partir del nitrógeno y el oxígeno del aire en presencia de altas temperaturas. Las emisiones de NOx están constituidas en su mayoría por NO y algunas trazas de  $\text{NO}_2$  y  $\text{N}_2\text{O}$ . Los NOx participan en las lluvias ácidas, son responsable de la acidificación de los sistemas acuáticos y de los suelos, y generan también problemas de salud pública como las alergias (Fluent Inc, 2005; Bartok y Sarofim, 1991). En algunos países europeos ya se han establecido reglamentos para controlar las emisiones de estas especies a la atmósfera (Flamme, 2001).

Debido a la fuerte influencia de la temperatura, la mayoría de las técnicas de reducción de NOx se enfocan en cortar los picos de temperaturas, manteniendo bajo el tiempo de residencia en áreas de alta temperatura y evitando altas concentraciones de oxígeno en estas áreas. Algunos de los métodos más comunes de control son el enfriamiento de llama, la combustión por etapas, la recirculación de productos de combustión, la combustión de premezcla pobre (Wünning y Wünning, 1997), el *reburning* (Nicolle y Dagaut, 2006; Yang y Blasiak, 2005; Wünning y Wünning, 1997) y la combustión con oxígeno (Flamme, 2001; Wünning y Wünning, 1997).

En los procesos de combustión, las zonas de alta temperatura de llama son las principales fuentes de NOx, formados a través de los mecanismos térmico, precoz y combustible (Cavaliere y Joannon, 2004). La formación de NOx térmicos es determinada por un conjunto de reacciones químicas que son altamente dependientes de la temperatura. Estas reacciones se conocen con el nombre de mecanismo de Zeldovich. Para mayor detalles de este mecanismo, se recomienda consultar la referencia (Fluent Inc, 2005). El mecanismo de los NOx térmicos solo es significativo a altas temperaturas (mayores a 1.800 K). A pesar de las bajas concentraciones de oxígeno en la zona de reacción, el mecanismo de NOx térmicos de Zeldovich no es abatido completamente (Tabacco *et al.*, 2002) y permanece activo en la combustión sin llama cuando hay grandes tiempos de residencia (Nicolle y Dagaut, 2006).

El mecanismo de NOx precoces fue propuesto inicialmente por Fenimore (1971) y se desarrolla principalmente en ambientes de combustión de baja temperatura, mezclas ricas en combustible y cortos tiempos de residencia. Tabacco *et al.* (2002) afirman que los NOx precoces constituyen una fracción insignificante de la producción neta de NO en la combustión sin llama ya que son minimizados por la no presencia de sitios instantáneos de alta temperatura.

Aparte de estos modelos, algunos estudios sugieren que el mecanismo de  $\text{N}_2\text{O}$  intermedio puede contribuir a la formación de cerca del 90% de los NOx en la combustión sin llama (Fluent Inc, 2005). El mecanismo del  $\text{N}_2\text{O}$  intermedio fue propuesto inicialmente por Malte y Pratt (1974) y es importante en condiciones de mezcla pobre y bajas temperaturas (menores a 1850 K). Tabacco *et al.* (2002) concluyeron que el mecanismo del  $\text{N}_2\text{O}$  intermedio es la principal ruta cinética de formación de NOx en la combustión sin llama. Por el contrario, Schütz *et al.* (2008) encontraron

numéricamente que la contribución de los mecanismos térmico, precoz y  $N_2O$  intermedio tienen aproximadamente la misma contribución a la formación global de  $NO_x$  en la combustión sin llama. Yang y Blasiak (Yang y Blasiak, 2005) usaron el mecanismo del  $N_2O$  intermedio y obtuvieron valores de  $NO$  entre 2,4 y 2,7 veces más grandes y más cercanos a los valores experimentales que cuando no hicieron uso de este mecanismo

En los *software* de CFD, las ecuaciones de transporte de  $NO_x$  se resuelven sobre un campo de flujo y combustión previamente establecido, lo cual significa que la predicción de  $NO_x$  hace parte de un postprocesamiento. Este procedimiento se justifica si se tiene en cuenta que el tiempo para las reacciones de  $NO_x$  es más grande que el tiempo de mezclado y la combustión de hidrocarburos (Yang y Blasiak, 2005; Awosope y Lockwood, 2005), lo cual permite suponer que las reacciones involucradas en la química del  $NO$  puede desacoplarse de las reacciones de combustión.

## Conclusiones

La combustión sin llama es una técnica que involucra el mezclado del aire y el combustible antes de reaccionar a una temperatura mayor a la de autoignición. Debido al abatimiento de los picos instantáneos de temperatura, en este régimen de combustión se logran disminuciones significativas de las emisiones de  $NO_x$  sin afectar la eficiencia térmica de los equipos.

Los códigos CFD son una herramienta fundamental para el estudio fenomenológico y optimización de diseños, en especial en los nuevos tipos de combustión en los que todavía existen vacíos de conocimiento por llenar. Tal es el caso de la combustión sin llama. Dichos códigos resuelven numéricamente ecuaciones que serían imposibles de resolver manualmente en aplicaciones industriales con flujos turbulentos y mecanismos de reacción complejos.

Según la revisión hecha en este trabajo, se reconocen los siguientes modelos como los más apropiados para la simulación de la combustión sin llama:

-Para la turbulencia, el modelo  $k-\epsilon$  estándar o  $k-\epsilon$  *Realizable*, siendo el modelo  $k-\epsilon$  estándar el de menor costo computacional.

-Para la combustión, el modelo *Finite Rate/Eddy Dissipation* con sus constantes modificadas para que dé mejor cuenta del retraso en la ignición y el modelo *Eddy Dissipation Concept*.

Para la radiación, el modelo más usado es el de ordenadas discretas, acompañado del cálculo del coeficiente de absorción de los gases de combustión con el modelo de suma ponderada de gases grises.

Para el postprocesamiento de los  $NO_x$ , es conveniente usar los modelos térmico, precoz y  $N_2O$  intermedio.

## Agradecimientos

Los autores desean expresar su más sincero agradecimiento a Colciencias por la financiación y apoyo en el programa de investigación en combustión sin llama que realiza el Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Racional de la Energía.

## Bibliografía

Amell, A. y Cadavid, F., Formación doctoral en energía térmica: una necesidad nacional., Ponencia en la XXVIII Reunión Nacional de ACOFI (Aceptada para publicación), Cartagena, ACOFI, septiembre, 2008.

Awosope, I. O., Lockwood, F. C., Prediction of combustion and  $NO_x$  emission characteristics of flameless oxidation combustion., IFRF Combustion Journal, Vol. Article Number 200501, 2005, pp. 1-28.

Bartok, W., Sarofim, A. F., Fossil Fuel Combustion: a Source Book., 1ª ed., New York, John Wiley & Sons., 1991.

Candel, S., Thevenin, D., Darabiha, N., Veynante, D., Progress in numerical combustion., Combustion Science and Technology, Vol. 149, 1999, pp. 297-337.

Cavaliere, A., Joannon, M.D., Mild Combustion., Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 30, 2004, pp. 329-366.

Coelho, P. J., Peters, N., Numerical simulation of a mild combustion burner., Combustion and flame, Vol. 124, 2001, pp. 503-518.

Dally, B. B., Christo, F. C., Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow., Combustion and flame, Vol. 142, 2005, pp. 117-129.

Dally, B. B., Riesmeier, E., Peters, N., Effect of Fuel Mixture on Moderate and Intense Low Oxygen Dilution Combustion., Combustion and flame, Vol. 137, 2004, pp. 418-431.

Delacroix, F., The flameless oxidation mode": An efficient combustion device leading also to very low  $NO_x$  emission levels (on line), 2004. Disponible en: [http://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/umweltthemen/industrie/IPPC\\_Konferenz/Delacroix.pdf](http://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/umweltthemen/industrie/IPPC_Konferenz/Delacroix.pdf).

Dong, W., Design of advanced industrial furnaces using numerical modeling method., tesis presentada a The Royal Institute of Technology, para optar al grado de Doctor of Philosophy, 2000

Fenimore, C. P., Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames., 13th symposium (international) on combustion. The Combustion Institute, 1971, pp. 373-380.

Ferrand, L., Modélisation et expérimentation des fours de réchauffage sidérurgiques équipés de brûleurs régénératifs à oxidation sans flamme., tesis presentada a la Ecole des Mines de Paris, para optar al grado de Docteur en Philosophie., 2003

Ferziger, J. H., Peric, M., Computational methods for fluid dynamics., 3ª ed., Berlin, Springer, 2002,

Flamme, M., Low  $NO_x$  combustion technologies for high temperature applications., Energy Conversion and Management, Vol. 42, 2001, pp. 1919-1935.

Fleck, B. A., Matovic, M. D., Grandmaison, E. W., Sobiesiak, A., Modelling of the Near Field of a Multi-jet Burner., IFRF Combustion Journal, Vol. Article No. 200306, 2003, pp. 1-15.

Fluent Inc., FLUENT 6.2 User's Guides (en línea), 2005. Disponible en: <http://www.engres.odu.edu/Applications/fluent6.2/help/pdf/ug/pdf.htm>.

Galleti, C., Parente, A., Tognotti, L., Numerical and experimental investigation of a mild combustion burner., Combustion and flame, Vol. doi: 10.1016/j.combustflame.2007.07.016, 2007, pp. 1-16.

Gupta, A. K., Flame Characteristics and Challenges with High Temperature Air Combustion., Proceedings of 2000 International Joint Power Generation Conference, Miami Beach, Florida, ASME, Julio, 2000, pp. 1-18

Hasegawa, T., Tanaka, R., High Temperature Air Combustion: Revolution in Combustion Technology., JSME International Journal, Series B, Vol. 40, 1998, pp. 1079-1084.

Hilbert, R., Tap, F., El-Rabii, H., Thévenin, D., Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations., Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 30, 2004, pp. 61-117.

- Kawai, K., Yoshikawa, K., Kobayashi, H., Tsai, J. S., Matsuo, M., Katsushima, H., High temperature air combustion boiler for low BTU gas., *Energy Conversion and Management*, Vol. 43, 2002, pp. 1563-1570.
- Lupant, D., Pesenti, B., Lybaert, P., Assessment of combustion models of a self-regenerative flameless oxidation burner., Mons (Bélgica), *Faculté Polytechnique de Mons*, 2004, pp. 1-7.
- Magnussen, B. F., Hjertager, B. H., On mathematical modelling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, *Pittsburg, Pennsylvania, The Combustion Institute 1976*, pp. 719-729
- Malte, P. C., Pratt, D. T., Measurement of atomic oxygen and nitrogen oxides in jet-stirred combustion., *Symposium (international) on combustion*, Vol. 15, 1974, pp. 1061-1070.
- Mancini, M., Schwöppea, P., Webera, R., Orsinob, S., On mathematical modelling of flameless combustion., *Combustion and flame*, 150, 2007, pp. 54-59.
- Masson, E., Etude Experimentale des Champs Dynamiques et Scalaires de la Combustion Sans Flamme., tesis presentada a L' Institut National des Sciences Appliquees de Rouen, para optar al grado de Docteur en Philosophie, 2005
- Milani, A., Wüning, J. A., What is the effect of flameless combustion on NOx formation?., *Combustion File*, No. 174, Ijmuiden (Holanda), *IFRF Online Combustion Handbook*, 2002a, pp. 1-4.
- Milani, A., Wüning, J. A., ¿What are the stability limits of flameless combustion?., *Combustion File No 173*, Ijmuiden (Holanda), *IFRF Online Combustion Handbook*, 2002b, pp. 1-6.
- Milani, A., Wüning, J. A., ¿What is Flameless Combustion?., *Combustion File No 171*, Ijmuiden (Holanda), *IFRF Online Combustion Handbook*, 2002c, pp. 1-8.
- Milani, A., Wüning, J.G., What is the effect of air preheat on process efficiency?., *Combustion File No 172*, Ijmuiden (Holanda), *IFRF Online Combustion Handbook*, 2002d, pp. 1-6.
- Murer, S., Pesenti, B., Lybaert, P., CFD Modelling of Flameless Combustion of Natural Gas in a 30 kW combustor., Mons (Bélgica), *Faculté Polytechnique de Mons*, 2004, pp. 1-6.
- Nicolle, A., Dagaut, P., Occurrence of NO-reburning in MILD combustion evidenced via chemical kinetic modeling., *Fuel*, Vol. 85, 2006, pp. 2469-2478.
- Patankar, S. V., *Numerical heat transfer and fluid flow.*, 1ª ed., USA, Taylor & Francis., 1980,
- Pesenti, B., Evrard, P., Sorriau, O., Lybaert, P., NOx production and heat transfer from a self-regenerative flameless oxidation burner., *Proceedings of the European Combustion Meeting 2003*, 2003, pp. 1-4.
- Poinsot, T., Veynante, D., *Theoretical and numerical combustion.*, 2ª ed., Philadelphia, R.T. Edwards Inc, 2005
- Ponzio, A., Senthooreselan, S., Yang, W., Blasiak, W., Eriksson, O., Ignition of single coal particles in high-temperature oxidizers with various oxygen concentrations., *Fuel*, Vol. 87, 2008, pp. 974-987.
- Pozzoli, A., Migliavaca, G., Perini, M., Parodi, E., Flameless combustion: Theoretical aspects and technological applications in the process industry (*on line*), 2003. Disponible en: <http://www.itas.com/English/NewsPressArea/NewsPressPdf/PressRelease/FlamelessCombustion.pdf>.
- Rafidi, N., Blasiak, W., Heat transfer characteristics of HiTAC heating furnace using regenerative burners., *Applied Thermal Engineering*, Vol. 26, 2006, pp. 2027-2034.
- Rendón, J. C., Simulación del efecto altitud sobre una llama de premezcla parcial., tesis presentada a Universidad de Antioquia, para optar al grado de Mágister en Ingeniería., 2007
- Sassi, M., Flame versus Flameless Combustion., *Mechanical Engineering Newsletter*, Vol. 2, 2006, pp. 3-4.
- Schütz, H., Lücknerath, R., Kretschmer, T., Noll, B., Aigner, M., Analysis of the pollutant formation in the FLOX combustion., *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 130, 2008, pp. 011503-1-011503-9.
- Shimo, N., Fundamental Research of Oil Combustion with Highly Preheated Air., *Proceedings of the 2nd International Seminar on High Temperature Combustion in Industrial Furnaces*, Vol. January 17-18, 2000.
- Sobiesiak, A., Rahbar, S., Becker, H. A., Performance Characteristics of the Novel Low-NOx CGRI Burner for Use with High Air Preheat., *Combustion and flame*, Vol. 115, 1998, pp. 93-125.
- Suzukawa, Y., Sugiyama, S., Hino, Y., Ishioka, M., Mori, I., Heat transfer improvement and NOx reduction by highly preheated air combustion., *Energy Conversion and Management*, Vol. 38 No. 10-13, 1997, pp. 1061-1071.
- Tabacco, D., Innarella, C., Bruno, C., Theoretical and Numerical Investigation on Flameless Combustion., *Combustion Science and Technology*, Vol. 174, No. 7, 2002, pp. 1-35.
- Tsuji, H., Gupta, A.K., Hasegawa, T., Katsuki, M., Kishimoto, K., Morita, M., High temperature Air Combustion: From Energy Conservation to Pollution Reduction., Vol. 1, Florida, CRC Press., 2003.
- Versteeg, H. K., Malalasekera, W., *An introduction to computational fluid dynamics.*, 1ª ed., New York, Longman Scientific & Technical., 1995,
- Weber, R., Smart, J. P., Kamp, W. V., On the (Mild) combustion of gaseous, liquid, and solids fuels in high temperature preheated air., *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, 2005, pp. 2623-2629.
- Weber, R., Verlaan, A. L., Orsino, S., Lallemand, N., On emerging furnace design methodology that provides substantial energy savings and drastic reductions in CO<sub>2</sub>, CO and NOx emissions., *Journal of the Institute of Energy*, Vol. 72, 1999, pp. 77-83.
- Wüning, J. G., Flameless combustion and its applications (*on line*), 2004. <http://www.bine.info/pdf/infoplus/FlamelessCombustion.pdf>. Acceso: 9 de agosto de 2008
- Wüning, J. A., Wüning, J. G., Flameless Oxidation to Reduce Thermal NO-Formation., *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 23, 1997, pp. 81-94.
- Wüning, J. G., FLOX - Flameless Combustion., *Memorias del THERMPROCESS Symposium 2003*, Dusseldorf (Alemania), THERMPROCESS, junio de 2003, pp. 1-19
- Yang, W., Blasiak, W., Mathematical modelling of NO emissions from high-temperature air combustion with nitrous oxide mechanism., *Fuel Processing Technology*, Vol. 86, 2005, pp. 943-957.
- Yang, W., Blasiak, W., CFD as Applied to High Temperature Air Combustion in Industrial Furnaces., *IFRF Combustion Journal*, Vol. Article No. 200603, 2006, pp. 1-22.