



**EPS**

Escola Politècnica

Superior

## Projecte/Treball Fi de Carrera

**Estudi:** Enginyeria Industrial. Pla 2002.

**Títol:** Simulació de processos de combustió de sòlids prims

**Document:** Memòria i Annexos: Volum 1 Memòria

**Alumne:** Javier Revert Peris

**Director/Tutor:** Antoni Pujol i Sagaró

**Departament:** Eng. Mecànica i de la Construcció Industrial

**Àrea:** Mecànica de Fluids

**Convocatòria** (mes/any): 09/2012

## **ÍNDEX**

1	Introducció .....	1
1.1	Antecedents .....	1
1.2	Objecte.....	1
1.3	Abast.....	1
2	La combustió de sòlids prims .....	2
2.1	El procés de combustió en sòlids .....	2
2.2	La modelització del procés de combustió .....	4
2.3	La velocitat de propagació de la flama – expressió analítica.....	7
2.4	Resultats experimentals.....	9
3	El Codi FLUENT .....	10
3.1	Les equacions de conservació.....	10
3.2	Els escalars definits per l'usuari (UDS).....	11
3.3	Les funcions definides per l'usuari (UDF) .....	12
3.4	Equació de transport de les espècies .....	13
4	La simulació del procés de combustió de sòlids en el Fluent.....	14
4.1	Geometria .....	14
4.2	Malla .....	14
4.3	Cas 1: Condicions inicials i Condicions de contorn .....	14
4.4	Cas 2: Condicions inicials i Condicions de contorn .....	17
5	Resultats Cas 1 .....	20
5.1	Introducció .....	20
5.2	Temperatura vs concentració d'oxigen .....	21
5.3	Comparació de les diferents concentracions .....	22
6	Resultats cas 2 .....	24
6.1	Introducció .....	24
6.2	Velocitat de propagació en funció de la concentració oxigen .....	25

6.3	Velocitat de propagació en funció dels paràmetres cinètics de l'equació de reacció de la combustió.....	28
6.4	Limits d'extinció.....	30
7	Resum del pressupost.....	32
8	Conclusions .....	33
9	Relació de documents .....	35
10	Bibliografia.....	36

## **EQUACIONS**

Eq. 1.-	Equació d'Arrhenius.....	2
Eq. 2.-	Flux màssic de fuel .....	2
Eq. 3.-	Temps d'ignició .....	4
Eq. 4.-	Equació de continuïtat .....	4
Eq. 5.-	Equació de conservació de l'energia .....	5
Eq. 6.-	Equació de conservació de les espècies per a fracció màssica d'oxigen.....	5
Eq. 7.-	Equació de conservació de les espècies per a fracció massica de fuel .....	5
Eq. 8.-	Terme de reacció de la fase gas.....	5
Eq. 9.-	Equació de la densitat del sòlid .....	6
Eq. 10.-	Equació de la conservació de l'energia .....	6
Eq. 11.-	Equació del flux de massa .....	6
Eq. 12.-	Equació de la temperatura de la flama adiabàtica.....	8
Eq. 13.-	Equació de la velocitat de la flama .....	8
Eq. 14.-	Equació de la conservació de massa .....	10
Eq. 15.-	Equació de la conservació de moment.....	10
Eq. 16.-	Equació de l'energia .....	10

Eq. 17.- Equació de la densitat del sòlid .....	11
Eq. 18.- Equació del transport de les espècies .....	13
Eq. 19.- Equació de la concentració en massa d'oxigen.....	15
Eq. 20.- Equació de la concentració en massa de fuel .....	15
Eq. 21.- Equació de la velocitat de fluxos volàtils.....	16
Eq. 22.- Equació de la concentració en massa d'oxigen.....	17
Eq. 23.- Equació de la concentració en massa de fuel .....	17
Eq. 24.- Equació del flux màssic .....	18

## **FIGURES**

Figura 1.- Factors que intervenen en la ignició d'un sòlid .....	3
Figura 2.- Condicions de contorn del cas 2 .....	7
Figura 3.- Condicions Inicials del Cas 1 .....	20
Figura 4.- Distribució de temperatura per diferents concentracions.....	22
Figura 5.- Distribució de temperatura per diferents concentracions.....	23
Figura 6.- Geometria del cas 2 .....	24
Figura 7.- Condicions inicials del cas 2 .....	25
Figura 8.- Gràfic de temperatura de la cambra per diferents concentracions .....	27

## **GRÀFICS**

Gràfic 1.- Temperatura en funció de la conentració en volum d'oxigen .....	21
Gràfic 2.- Velocitat de propagació en funció de la concentració d'oxigen en volum .....	26
Gràfic 3.- Velocitat de propagació en funció de l'energia d'activació del gas. Cas per $X_o=0,23$ .....	29

Gràfic 4.- Velocitat de propagació en funció del terme preexponencial del gas. Cas amb $X_o = 0,23$ .....	30
---	----

## **TAULES**

Taula 1.- Velocitat de propagació de la flama en funció de la concentració d'oxigen ambient	9
Taula 2.- Error en la determinació de la temperatura.....	21
Taula 3.- Errors en la velocitat de propagació de la flama de la simulació i la part teòrica respecte l'experimental .....	26
Taula 4.- Resum del pressupost.....	32

## **1 INTRODUCCIÓ**

### **1.1 Antecedents**

La combustió és un fenomen complex que s'observa en molts processos industrials. En l'actualitat, molts d'aquests processos de combustió es poden simular mitjançant models incorporats en programaris comercials de dinàmica de fluids. Aquests són, entre d'altres, la combustió de gasos premesclats, de gasos no premesclats i de combustibles líquids. Models per a la crema de combustibles sòlids (com paper, per exemple) encara no estan disponibles i això fa que, en principi, aquests tipus d'estudis encara no puguin usar totes les capacitats de potència de càlcul, facilitat d'ús i flexibilitat que els programaris comercials de dinàmica de fluids computacional tenen. Aquests programes, però, disposen d'unes eines que permeten incorporar noves variables i paràmetres i, per això, és interessant investigar si, per aquesta via, es pot desenvolupar un model de combustió de sòlids.

### **1.2 Objecte**

L'objecte del present projecte consisteix en investigar les capacitats del programari de dinàmica de fluids computacional FLUENT per simular processos transitoris de combustió quan es cremen sòlids. Com el programari FLUENT no incorpora cap mòdul de combustió de sòlids prims, s'hauran de realitzar les funcions d'usuari adients per tal d'incorporar les equacions i les condicions de contorns que són rellevants en aquests tipus de problemes. El model resultant es validarà amb dades experimentals per a la combustió de fulls de cel·lulosa en flames bidimensionals. També es durà a terme una anàlisi de sensibilitat de la solució variant els paràmetres del model. En funció dels resultats de la validació es durà a terme una extensió del model per a situacions tridimensionals.

### **1.3 Abast**

L'abast del projecte no inclou la realització d'experiments.

## 2 LA COMBUSTIÓ DE SÒLIDS PRIMS

### 2.1 El procés de combustió en sòlids

Abans d'introduir el concepte de propagació de la flama, descriurem els factors que controlen la combustió de sòlids prims explicant les etapes de què consta aquest procés:

- 1) Escalfem el sòlid, augmentant la seva temperatura fins a produir producte pirolític que despendrà gasos que són combustibles. Aquesta descomposició de producció de combustible gasós es pot expressar amb la següent equació d'Arrhenius que descriu la variació de la densitat del sòlid:

$$\frac{d\rho_s}{dt} = -\rho_s A_s e^{-E_s/(RT)}$$

Eq. 1.- Equació d'Arrhenius

on  $A_s$  i  $E_s$  són el terme preexponencial i l'energia d'activació del sòlid, respectivament. A l'equació anterior  $R$  és la constant del gas. Com amb la pura evaporació del líquid, aquesta és funció lineal de la temperatura on hi ha una certa temperatura crítica,  $T_{py}$ , per permetre una concentració de vapor de combustible prou important com per poder portar a terme la ignició. Per a un sòlid prim, el flux de massa de fuel que surt de la superfície pot ser descrita com :

$$m_F'' = \int_0^{\delta_{py}} A_s \rho_s e^{-E_s/(RT)} dx$$

Eq. 2.- Flux màssic de fuel

on  $\delta_{py}$  és la meitat del gruix del sòlid prim. Aquest procés el podem observar a la Figura 1. S'ha de tenir present que abans que la temperatura de la superfície superi  $T_{py}$  l'alliberament del vapor combustible és insignificant. A  $T_{py}$ , el valor  $m_F''$  és suficient per permetre la ignició.

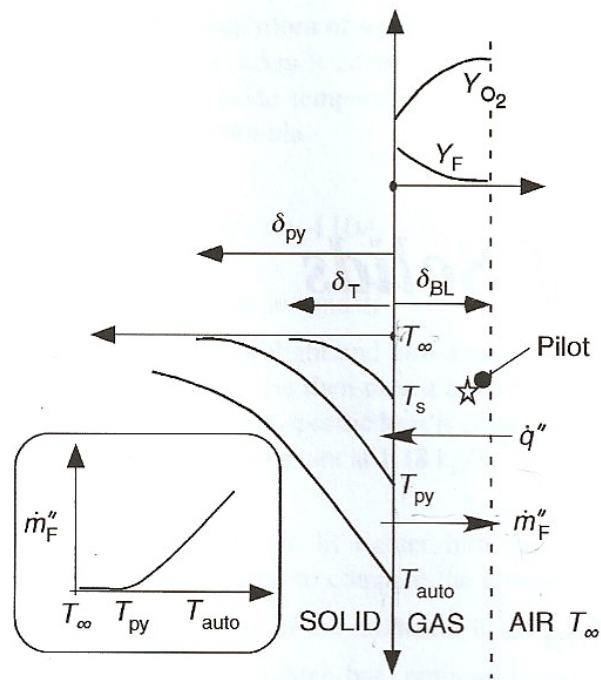


Figura 1.- Factors que intervenen en la ignició d'un sòlid

- 2) El gas combustible després en el procés de piròlisi serà transportat a través de la capa límit del fluid on es barreja l'aire ambient amb el combustible. Per a la ignició controlada, una font d'energia suficient com una espurna elèctrica o una flama haurà d'estar situada on la mescla de combustible és inflamable,  $X_F \geq X_L$ . Per a l'autoignició, haurem d'aconseguir un volum suficient de gas perquè assoleixi la temperatura d'autoignició ( $\sim 300-500^\circ\text{C}$ ). Si el sòlid s'escalfa per radiació, llavors o bé la transferència de calor des de la superfície o bé l'absorció per radiació a la capa límit han d'augmentar la temperatura de la barreja fins al seu valor d'autoignició. Aquesta ha de ser una mica més gran que la temperatura de superfície,  $T_{py}$ , que es necessita per a la ignició controlada.

S'ha de tenir present que per a un material que conté carboni, l'oxidació de la superfície pot succeir abans que la ignició en la fase gasosa. Això és possible per el cas d'autoignició o per a fluxos de calor petits.

En el cas de la ignició controlada, a  $T_{py}$  una massa de combustible suficient és alliberada a la superfície. En el cas del foc el combustible gasós vaporitzat en el procés de piròlisi es difondrà per convecció natural turbulenta amb l'aire que entra dins de la capa límit. Això comportarà un augment en el temps per arribar a l'anomenat punt de control de la flama.



- 3) Un cop la barreja inflamable està al punt de control, hi haurà un altre interval de temps per tal que la reacció química arribi a la condició d'inflamació.

Aquestes tres etapes ens permeten expressar el temps per a la ignició com la suma dels temps de cada etapa:

$$t_{ig} = t_{py} + t_{mix} + t_{chem}$$

Eq. 3.- Temps d'ignició

on:

- $t_{py}$  = temps de conducció de l'escalfor per al sòlid fins assolir  $T_{py}$ .
- $t_{mix}$  = temps de difusió o de transport necessari perquè la concentració de combustible inflamable i l'oxigen arribin al punt de control.
- $t_{chem}$  = temps necessari perquè la barreja inflamable procedeixi a la combustió un cop arribat al punt de control

## 2.2 La modelització del procés de combustió

En aquest apartat descrivim un dels models més comuns usats per descriure el procés de combustió en sòlids prims (West, 1998) amb l'objectiu de determinar-ne la velocitat de propagació de la flama. Normalment, diversos autors resolen aquest model de forma numèrica aplicant la tècnica dels volums finits. La utilització d'un model específicament pensat per resoldre el procés de combustió, però, comporta que sigui molt difícil aplicar-lo a geometries diferents, per exemple. Per això és molt interessant poder reproduir el procés de simulació amb un programa comercial com el FLUENT que té una gran flexibilitat.

En un model de combustió de dues dimensions com el de la Figura 2 el sistema es divideix en fase gas i en fase sòlida. Les equacions que descriuen el comportament a la fase gas són:

1. Equació de continuïtat

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m$$

Eq. 4.- Equació de continuïtat

## 2. Equació de conservació de l'energia

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} + c\rho u_x \frac{\partial T}{\partial x} + c\rho u_y \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + q\omega$$

Eq. 5.- Equació de conservació de l'energia

## 3. Equacions de conservació de les espècies

$$\rho \frac{\partial Y_0}{\partial t} + \rho u_x \frac{\partial Y_0}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial Y_0}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_0 \frac{\partial Y_0}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho D_0 \frac{\partial Y_0}{\partial y} \right) - f\omega$$

Eq. 6.- Equació de conservació de les espècies per a fracció màssica d'oxigen

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} + \rho u_x \frac{\partial Y_F}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial Y_F}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_F \frac{\partial Y_F}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho D_F \frac{\partial Y_F}{\partial y} \right) - \omega$$

Eq. 7.- Equació de conservació de les espècies per a fracció massica de fuel

## 4. El terme de reacció de la fase gas:

$$\omega = A\rho^2 Y_0 Y_F e^{-E/RT}$$

Eq. 8.- Terme de reacció de la fase gas

on:

- $c$  és el calor específica
- $\rho$  és la densitat
- $T$  és la temperatura
- $u_x$  és la velocitat en component  $x$
- $u_y$  és la velocitat en component  $y$
- $\lambda$  és la conductivitat del gas
- $q$  és el calor de reacció de combustió per unitat de massa
- $E$  és l'energia d'activació
- $R$  és la constant del gas
- $D$  és la difusivitat màssica de fuel o d'oxigen
- $f$  és el coeficient entre els valors estequiomètrics d'oxidant i fuel

Mentre que les que descriuen el comportament de la fase sòlida són:

$$\frac{d\rho_s}{dt} = -\rho_s A_s e^{-E_s/(RT)}$$

Eq. 9.- Equació de la densitat del sòlid

$$\rho_s C_s \frac{dT}{dt} = -\nabla S_f - \frac{\partial \rho_s}{\partial t} L$$

Eq. 10.- Equació de la conservació de l'energia

$$m_F'' = -\int_0^{\tau} \frac{\partial \rho_s}{\partial t} dy$$

Eq. 11.- Equació del flux de massa

on

- $\rho_s$  és la densitat del sòlid
- $A_s$  és el factor preexponencial per a la reacció de piròlisi
- $E_s$  és l'energia d'activació per a la reacció de piròlisi
- $R$  és la constant del gas
- $T$  és la temperatura
- $S_f$  és el terme que representen els fluxos de calor a la superfície
- $L$  és el calor latent de vaporització
- $\tau$  és la meitat del gruix del paper

En aquest model de combustió de sòlids prims, les condicions de contorn es descriuen com:

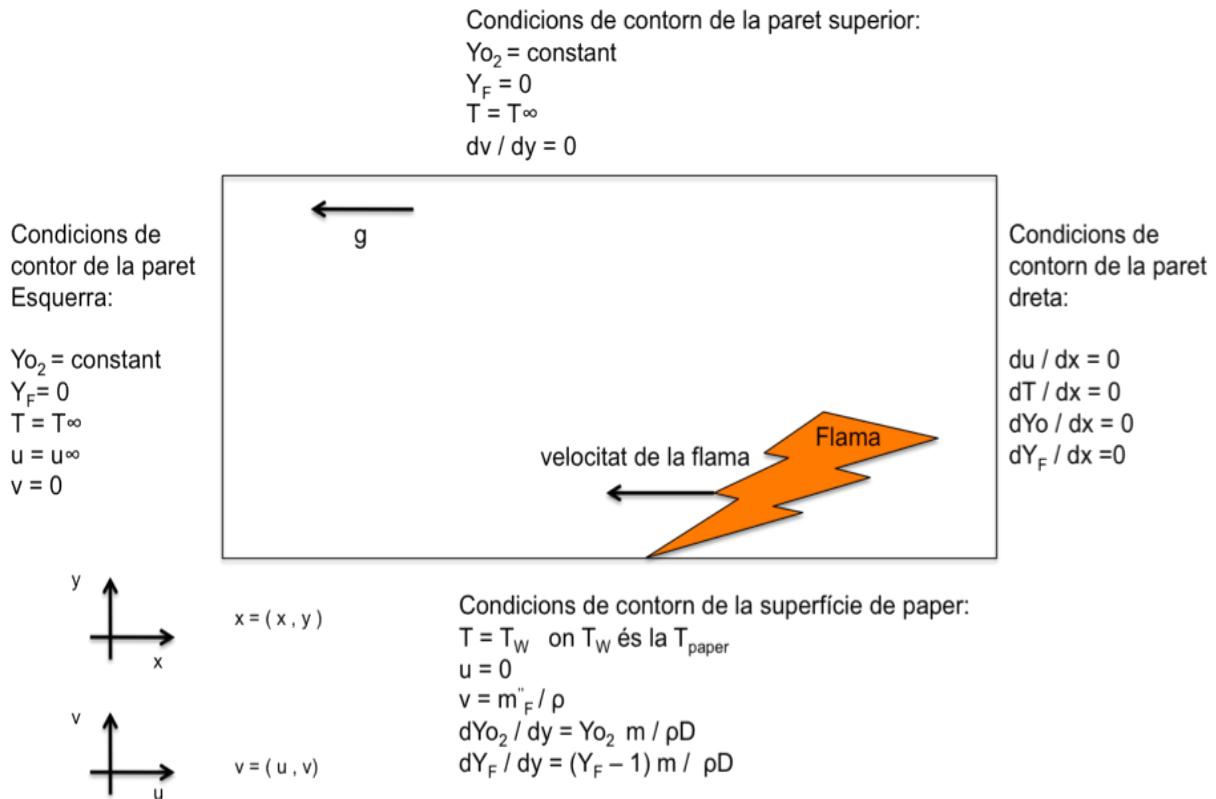


Figura 2.- Condicions de contorn del cas 2

### 2.3 La velocitat de propagació de la flama – expressió analítica

La simulació del model anterior mitjançant mètodes numèrics permet determinar la velocitat de propagació de la flama. Tanmateix, de Ris (1969) troba que el sistema d'equacions anterior, amb les condicions de reaccions químiques instantànies, difusivitats màssiques i tèrmiques idèntiques i propietats físiques i coeficients de transport constant permet una solució analítica per a la velocitat de propagació de la flama.

L'expressió per a la temperatura de la flama adiabàtica que s'utilitza per estimar la velocitat de propagació de la flama s'obté a partir de resoldre un model 1-D de flama prima. En aquest tipus de model, se suposa que la flama és difusiva i que l'oxidant i el fuel ocupen regions diferents del domini. La frontera (sense gruix) entre la regió amb només oxidant (més gasos inerts) i la regió amb només fuel (més gasos inerts) correspon a la flama.

Amb aquestes condicions, s'obté que la temperatura de la flama adiabàtica  $T_f$  es pot expressar com (Greenberg i Ronney, 1993):

$$T_f = T_0 + \left( \frac{Y_o / f}{1 + Y_o / f} \right) \left( \frac{q - L}{c} + T_v - T_0 \right)$$

Eq. 12.-Equació de la temperatura de la flama adiabàtica

On:

- $T_0$  és la temperatura ambient
- $Y_o$  és la concentració màssica d'oxigen ambient
- $q$  és la calor de combustió per unitat de massa de fuel
- $L$  és la calor latent de vaporització del sòlid
- $c$  és la calor específica del gas
- $T_v$  és la temperatura de piròlisi
- $f$  és la ratio estequiomètrica entre la massa d'oxidant i la de fuel

Una vegada s'ha generat la flama, aquesta pot ser suficient com per escalfar la zona verge de la mostra fins que assoleixi el procés de piròlisi i torni a començar el procés de combustió ara, però, en una posició més avançada. La successió d'aquests esdeveniments genera un front de combustió que es propaga cap a la zona verge. La determinació de la velocitat de propagació d'aquest front de flama és un tema molt important en el camp de la combustió.

A partir de resoldre un model simplificat de les equacions de combustió i del seu acoblament amb la fase sòlida, de Ris (1969) obté una expressió analítica per a la velocitat del front de flama  $V_f$  com:

$$V_f = \frac{\pi}{4} \frac{\lambda(T_f - T_v)}{\rho_s c_s \tau(T_v - T_0)}$$

Eq. 13.- Equació de la velocitat de la flama

on:

- $\lambda$  és la conductivitat del gas,
- $\rho_s$  és la densitat del sòlid

- $c_s$  és la calor específica del sòlid
- $\tau$  és la meitat del gruix de la mostra

Les simulacions que durem a terme en aquest estudi es compararan amb les prediccions de l'equació analítica de de Ris

## 2.4 Resultats experimentals

Les simulacions també es compararan amb els resultats experimentals per tal de validar-ne el comportament. Aquí farem servir les dades de Comas i Pujol (2012) que han cremat mostres de cel·lulosa de gruix 0,18 mm per a diferents concentracions d'oxigen en el laboratori de Lubricants i Combustibles de l'EPS.

A partir del estudi de les imatges enregistrades en aquests experiments s'obtenen les següents velocitats de propagació de la flama

$X_{O_2}$	v (cm/s)
0,22	0,3
0,25	0,41
0,3	0,51
0,5	0,92

Taula 1.- Velocitat de propagació de la flama en funció de la concentració d'oxigen ambient

On  $X_{O_2}$  és la concentració molar d'oxigen inicial i la velocitat v correspon a la mitjana de tres repeticions de l'experiment amb les mateixes condicions. Per a qualsevol concentració molar d'oxigen, la variació màxima entre el valor mesurat de la velocitat i la mitjana és inferior a 0.03 cm/s.

Tal i com s'ha comentat anteriorment un dels objectius d'aquest projecte és la comparació d'aquests resultats amb els resultats de les simulacions amb CFD.

Per al nostre material, els valors per a les propietats físiques són:

- $\rho_s = 460 \text{ kg m}^{-3}$
- $c_s = 1000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
- $T_v = 620 \text{ K}$
- $\tau = 0.0933 \text{ mm}$ .

### 3 EL CODI FLUENT

#### 3.1 Les equacions de conservació

El procés de simulació genèric amb CFD s'explica a l'Annex A. Aquí s'expliquen els detalls del procés concret de combustió del present estudi. Per això, aquí s'introduiran les equacions que hem aplicat al programa per obtenir un procés de combustió de sòlids prims.

El codi FLUENT és un software comercial d'Ansys Inc que permet simular una gran varietat de processos amb fluids.

Les equacions bàsiques que resol el FLUENT són les següents:

##### 3.1.1 Equació de conservació de la massa o Equació de continuïtat

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m$$

Eq. 14.- Equació de la conservació de massa

Aquesta és la forma general per a l'equació de conservació de la massa i és vàlida tant per a fluxos compressibles com per incompressibles. A l'equació anterior,  $S_m$  és un terme font de massa que pot ser definit per l'usuari (UDS).

##### 3.1.2 Equació de conservació de moment lineal

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Eq. 15.- Equació de la conservació de moment

on  $p$  és la pressió estàtica,  $\bar{\bar{\tau}}$  és el tensor de tensions i  $\rho \vec{g}$  i  $\vec{F}$  són les forces gravitacionals i les forces externes al cos per unitat de volum, respectivament. El terme  $\vec{F}$  també pot contenir altres termes fonts com escalars definits per l'usuari (UDS).

##### 3.1.3 L'Equació de conservació de l'energia

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left( k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\bar{\tau}}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h$$

Eq. 16.- Equació de l'energia

on  $k_{eff}$  és la conductivitat efectiva,  $\vec{J}_j$  és el flux de difusió de l'espècie  $j$ . Els primer tres termes de la dreta de la equació anterior representen la transferència de energia degut a la conducció, la difusió d'espècies i la dissipació viscosa, respectivament.  $S_h$  inclou la calor de la reacció química i qualsevol altre font de calor volumètrica que es pugui haver definit.

Les anteriors tres equacions no són suficients per simular el comportament del nostre cas i per tant, s'hauran de definir noves variables, mitjançant User Defined Scalars (UDS), i també noves funcions, mitjançant les User Defined Functions (UDF). Un cop afegides podrem definir correctament les condicions inicials, les condicions de contorn, la mescla, els termes fonts, l'entrada de calor, etc.

## 3.2 Els escalars definits per l'usuari (UDS)

### 3.2.1 Definició

Les UDS són escalars definits pels usuaris. A l'Annex C es troba una descripció més ampliada de les UDS.

En les primeres experimentacions amb el programa es van definir dos escalars que eren: la concentració en massa de oxigen ( $Y_o$ ) i la concentració en massa de fuel ( $Y_f$ ).

Aquests escalars s'utilitzaven en diverses funcions d'usuari (UDF) com, per exemple, en els termes fonts de l'equació de l'energia per a la fase gas.

El problema que es va trobar al resoldre aquesta situació és que el FLUENT no et deixa fixar uns límits per a les variables introduïdes amb UDS i, per tant, els valors d' $Y_o$  i d' $Y_f$  podrien arribar a ser negatius o superiors a 1.. Per aquesta causa s'ha tingut que resoldre el cas mitjançant l'Equació del transport de les Espècies, que està explicada a l'apartat 3.4.

Així, finalment, l'únic escalar que s'ha introduït per resoldre el procés de combustió del sòlid ha estat el que hem definit com la determinació de la densitat del sòlid, mitjançant la següent Equació d'Arrhenius:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = -\rho_s A_s \cdot e^{-\frac{E_s}{RT_s}}$$

Eq. 17.- Equació de la densitat del sòlid



### 3.3 Les funcions definides per l'usuari (UDF)

#### 3.3.1 Definició

Les UDF són les funcions que pot definir l'usuari i carregar-les a l'ANSYS FLUENT per resoldre un determinat cas. A l'Annex D es troben més detallades les UDFs. Les característiques més importants són:

- Estan escrites en un arxiu que utilitza el llenguatge de programació C. Aquest arxiu es pot escriure amb la majoria d'editors de text i es guarda amb l'extensió ".c". Un arxiu pot contenir una o varies UDF.
- Cada arxiu de codi ha de continuar l'arxiu "udf.h" (#include "udf.h") perquè l'UDF quedi ben linkada amb el codi font del FLUENT.
- Han d'estar definides utilitzant les DEFINE\_MACROS subministrades per ANSYS FLUENT. En el nostre cas farem servir les següents:
  - DEFINE\_PROFILE: serveix per definir una condició de contorn que varia en funció de l'espai o del temps.
  - DEFINE\_SOURCE: serveix per especificar els termes fonts dels diferents tipus d'equacions de transport resoltes per ANSYS FLUENT.
  - DEFINE\_ADJUST: serveix per ajustar o modificar les variables d'ANSYS FLUENT.
  - DEFINE\_EXECUTE\_AT\_END: és una macro que s'executa al final d'una iteració en estat estacionari, o al final d'un pas de temps en una execució transitòria.
- S'executen interpretant o compilant funcions a l'ANSYS FLUENT

#### 3.3.2 Utilització

Les UDF s'utilitzen per ajudar a l'ANSYS FLUENT a solucionar cada cas en particular, on l'usuari podrà entrar les seves equacions i variar-les si és necessari.

#### 3.3.3 Exemple

Aquí es pot observar un exemple que s'ha utilitzat en les etapes prèvies del present estudi on es pot veure el tipus de codi utilitzat:

```

#include "udf.h"

DEFINE_SOURCE(font_uds,cell,thread)
{
    real source;

    source=1.e+6*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_UDSI(cell,thread,0)*C_UD
SI(cell,thread,1)*exp(-100000./(8.314*C_T(cell,thread)));

    return source;
}

```

En l'exemple anterior, es defineix un terme font, anomenat source, que depèn de la densitat del medi (C\_R(cell,thread)) de la temperatura (C\_T(cell,thread)) i dels escalars definits per l'usuari C\_UDSI(cell,thread,0) i C\_UDS(cell,thread,1) on cell fa referència a una cel·la del conjunt de cel·les incloses en un domini anomenat thread.

### 3.4 Equació de transport de les espècies

Quan s'escull la resolució mitjançant les equacions de conservació per a espècies químiques, ANSYS FLUENT preveu la fracció de massa local per a cada espècie,  $Y_i$ , mitjançant la solució de l'equació de convecció-difusió per a cada espècie. Aquesta equació té la forma següent:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i$$

Eq. 18.- Equació del transport de les espècies

on  $R_i$  és la taxa neta de producció d'espècies per a la reacció química  $i$ ,  $S_i$  és la taxa de creació per addició de la fase dispersa més els termes fonts associats a possibles UDS. Una equació d'aquesta forma pot ser resolta per N-1 espècies on N és el nombre total d'espècies químiques de la fase de fluids presents en el sistema. Atès que la fracció de massa de les espècies han de sumar la unitat, la fracció N-èsima es determina com 1 menys la suma de les N-1 fraccions de massa. Per minimitzar l'error numèric, l'espècie N-èsima s'ha de triar de tal manera que es correspongui amb les espècies amb la fracció de massa més petita.

## **4 LA SIMULACIÓ DEL PROCÉS DE COMBUSTIÓ DE SÒLIDS EN EL FLUENT**

En aquest capítol descriurem com hem definit el procés de combustió de sòlids en el FLUENT que és una opció que no té per defecte. Per això, s'ha intentat que el FLUENT resolgués les equacions del model de combustió de l'apartat 2.2, mitjançant la utilització d'UDS i d'UDF. Això ha estat un procés molt lent fins assolir la configuració més adient. Aquí exposarem les simulacions que ens han donat els resultats més satisfactoris.

### **4.1 Geometria**

S'han realitzat diversos experiments en el qual hi han hagut dues geometries diferenciades.

- Cas 1: geometria quadrada de 50x50mm
- Cas 2: geometria rectangular de 100x50 mm

### **4.2 Malla**

Les malles que es crearan per als diferents experiments hauran estat creades amb el programa Gambit, com s'explica a l'Annex A.

Per als dos tipus de geometria hi haurà dos mallats diferents.

- La geometria quadrada de 50x50mm té un espai entre cel·les de 0,2mm i té un creixement de les cel·les desde la zona més important a estudiar fins a l'altre extrem. Aquest creixement serà de l'1,1% fins a una mida màxima de 0,5mm. Té un total de 60000 elements.
- La geometria rectangular de 100x50mm utilitza un espai entre cel·les de 0,3mm amb un total de 55000 elements.

### **4.3 Cas 1: Condicions inicials i Condicions de contorn**

A l'Annex E estan desenvolupades totes le condicions inicials i de contorn mitjançant el codi C que compila el FLUENT. A continuació s'expliquen alguns dels apartats que té el Cas 1.

### 4.3.1 Condicions inicials

Per a la regió compresa entre  $y < 0,025$  m i  $x > 0,025$  m, aplicarem una temperatura de 1000 K, una concentració de fuel de 0,7 i no hi haurà concentració d'oxigen.

A la resta de la superfície hi ha una temperatura de 300 K, una concentració de fuel nul·la i una concentració d'oxigen de 0,23. Cal dir que aquesta concentració serà variada per observar diferents comportaments en els experiments.

### 4.3.2 Mixed oxygen

El programa en C conté la DEFINE\_PROFILE "Unsteady mixed boundary condition per  $Y_0$ " que serveix per determinar les condicions de contorn a la superfície del paper que, per a la concentració en massa d'oxigen és :

$$\frac{\partial Y_0}{\partial y} = \frac{m''}{\rho \cdot D} Y_0$$

Eq. 19.- Equació de la concentració en massa d'oxigen

On  $Y_0$  és la concentració en massa d'oxigen,  $\rho$  és la densitat de l'aire,  $D$  és la difusivitat i  $m''$  és el flux dels volàtils.

### 4.3.3 Mixed fuel

D'igual forma, el programa en C conté la DEFINE\_PROFILE "Unsteady mixed boundary condition per  $Y_F$ " que serveix per determinar les condicions de contorn a la superfície del paper que, per a la concentració en massa de fuel és:

$$\frac{\partial Y_F}{\partial y} = \frac{m''}{\rho \cdot D} (Y_F - 1)$$

Eq. 20.- Equació de la concentració en massa de fuel

On  $Y_F$  és la concentració en massa de fuel,  $\rho$  és la densitat de l'aire,  $D$  és la difusivitat i  $m''$  és el flux dels volàtils.

### 4.3.4 Temperatura de la superfície

La temperatura de la superfície del paper serà de 300 K per una  $x < 0,025$  m i per  $x > 0,025$  m serà de 620 K. Està fixada, per tant, la posició de la zona cremada de la no cremada.

#### 4.3.5 Velocitat dels fluxos volàtils

La velocitat del fluxos volàtils estarà definida, per a la regió compresa entre  $y < 0,001$  m i  $x > 0,025$  m. La velocitat en l'eix X serà 0 i la de l'eix Y vindrà definida per la següent equació que depèn de la distància respecte l'eix x.

$$V_y = \frac{100 \cdot 1,823e - 6 \cdot 430}{1,2} \cdot \frac{0,05 - x}{0,025}$$

Eq. 21.- Equació de la velocitat de fluxos volàtils

Aquesta equació per a la velocitat normal a la superfície reproduïx el comportament observat en simulacions obtingudes amb complexos models de combustió (per exemple, West, 1998).

#### 4.3.6 El programa en C

El programa en C conté les següents funcions d'usuari que corresponen a:

- DEFINE\_INIT (cond\_ini,d): definició de les condicions inicials
- DEFINE\_EXECUTE\_AT\_END (valor\_m): valor del flux màssic. Aquest valor està predeterminat.
- DEFINE\_PROFILE (mixedoxygen): és la condició de contorn per  $y_o$  comentada anteriorment.
- DEFINE\_SOURCE (font\_fuel): serveix per definir el terme font de l'Eq 7.
- DEFINE\_SOURCE (font\_oxigen): serveix per definir el terme font de l'Eq. 8.
- DEFINE\_SOURCE (font\_temp): serveix per definir el terme font de l'Eq 5.
- DEFINE\_PROFILE (mixedfuel): és la condició de conotr n de  $y_F$  a la superfície també comentada anteriorment.
- DEFINE\_PROFILE (temp\_surf): és el valor de la temperatura a la superfície.
- DEFINE\_ADJUST(vel\_adjust\_comb) valor de la velocitat del flux de piròlisi comentat anteriorment.

Cal remarcar que el cas 1 consisteix en un dels múltiples casos de prova que es van fer ja que es fixar la posició de la flama a la meitat del domini i, per tant, forcem a que la flama sigui estacionària. Les condicions de contorn fan, a més, que la flama no es pugui propagar

i, també, la simulació es fa en estat estacionari. Això és així ja que aquest cas era un dels múltiples casos de prova per investigar les capacitats del FLUENT per simular la combustió en sòlids prims. A diferència de moltes altres proves, però, aquest cas sí que va generar una flama clarament observable en el domini.

#### 4.4 Cas 2: Condicions inicials i Condicions de contorn

Aquest cas 2 sí que correspon a una situació transitòria on la flama es podria propagar. A l'Annex F estan desenvolupades totes les condicions inicials i de contorn per compil·lar-lo en el FLUENT. A continuació s'expliquen les particularitats més significatives que té el Cas 2.

##### 4.4.1 Condicions inicials

S'aplicarà, per a la regió compresa entre  $y < 0,005$  m i  $x > 0,08$  m, una temperatura de 1000 K, una concentració de fuel de 0,7 i no hi ha concentració d'oxigen.

A la resta del domini es fixa una temperatura inicial de 300 K, una concentració de fuel nul·la i una concentració d'oxigen variable en funció de l'experiment.

##### 4.4.2 Mixed oxigen

Com en el cas 1 anterior el programa en "Unsteady mixed boundary condition per  $Y_0$ " serveix per aplicar la següent condició de contorn a la superfície del sòlid:

$$\frac{\partial Y_0}{\partial y} = \frac{m''}{\rho \cdot D} Y_0$$

Eq. 22.- Equació de la concentració en massa d'oxigen

On  $Y_0$  és la concentració en massa d'oxigen,  $\rho$  és la densitat de l'aire,  $D$  és la difusivitat i  $m''$  és el flux dels volàtils.

##### 4.4.3 Mixed fuel

Com en el cas 1 anterior, el programa en "Unsteady mixed boundary condition per  $Y_F$ " serveix per aplicar la condició de contorn a la superfície del sòlid:

$$\frac{\partial Y_F}{\partial y} = \frac{m''}{\rho \cdot D} (Y_F - 1)$$

Eq. 23.- Equació de la concentració en massa de fuel

On  $Y_F$  és la concentració en massa de fuel,  $\rho$  és la densitat de l'aire,  $D$  és la difusivitat i  $\dot{m}''$  és el flux dels volàtils.

#### 4.4.4 Flux màssic de piròlisis

En el cas 1 anterior, el flux màssic el teníem fixat en el domini i, per tant, impedíem que hi hagués cap propagació. En aquest cas 2 el flux associat a la piròlisi  $\dot{m}''$  d'acord amb West (1998) i Bhattacharjee et al. (2004) el definim com:

$$\dot{m}_F'' = \left[ \frac{\rho_s T_w^2 A_s \lambda_s R}{E_s [3,615 \Delta h_v^o + 4,605 c_s (T_w - T_\infty)]} \right]^{1/2} e^{-\frac{E_s}{2RT_w}}$$

Eq. 24.- Equació del flux màssic

on:

- $\rho_s$  és la densitat del sòlid
- $T_w$  és la temperatura del paper
- $A_s$  és el factor preexponencial de l'equació de piròlisi
- $\lambda_s$  és la conductivitat del sòlid
- $R$  és la constant ideal del gas
- $c_s$  és la calor específica del sòlid
- $h_v^o$  és la calor latent de vaporització
- $T_\infty$  és la temperatura d'ambient
- $E_s$  és la energia d'activació de l'equació de piròlisi

#### 4.4.5 El programa en C

El programa en C inicialment defineix totes les constants, amb el seu identificador i el seu valor. Per exemple, per a la concentració en massa d'oxigen, es defineix com "#define yoinf 0,244", que significa que li hem posat de nom yoinf i un valor de 0,244.

- DEFINE\_SOURCE (font\_fuel): serveix per definir el terme font de l'Eq 7.
- DEFINE\_SOURCE (font\_densolid): serveix per definir el terme de flux màssic de l'Eq. 24 que serveix com el terme font de l'Eq.9

- DEFINE\_SOURCE (font\_temp): serveix per definir el terme font de l'eq 5.
- DEFINE\_PROFILE (mixedoxygen) és la condició de contorn per  $y_O$  a la superfície comentada anteriorment.
- DEFINE\_PROFILE (mixedfuel) és la condició de contorn per  $y_F$  a la superfície comentada anteriorment.
- DEFINE\_PROFILE (m\_f) és la definició del valor de la taxa de generació de calor de la superfície.
- DEFINE\_PROFILE (T\_f) és la definició de la temperatura de la superfície.
- DEFINE\_INIT (cond\_ini) és la definició de les condicions inicials.



## 5 RESULTATS CAS 1

### 5.1 Introducció

En el primer estudi treballarem amb una geometria quadrada que tal i com es pot observar a la Figura 3, es diferencia en dues zones: la zona quadrada inferior (zona 1) i la resta (zona 2).

Les condicions inicials d'aquest cas seran:

- Temperatura de 1000 K a la zona 1 i 300 K a la zona 2.
- Concentració d'oxigen serà de 0% a la zona 1 i variable a la zona 2.
- La concentració màssica de fuel serà del 70% a la zona 1 mentre que a la zona 2 serà del 0%.

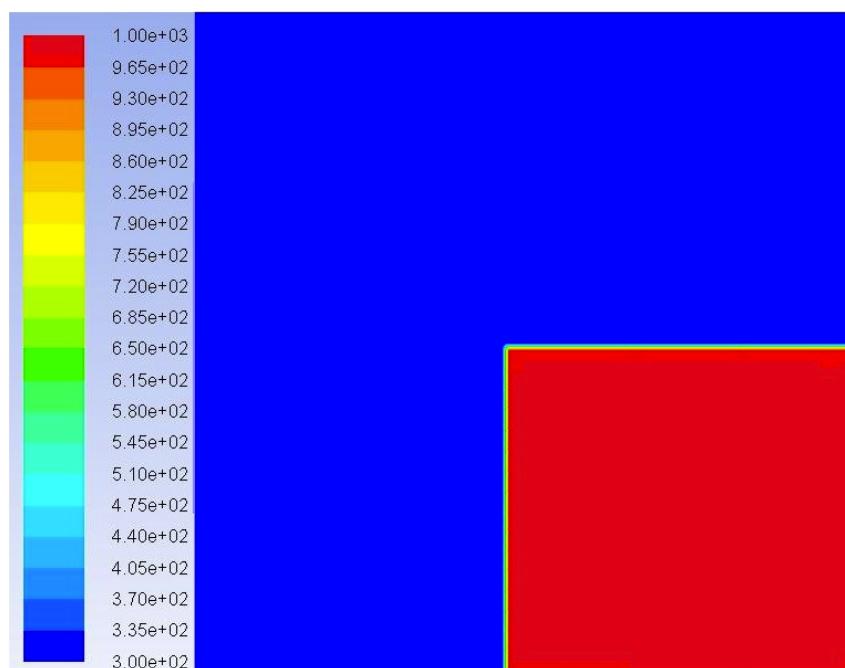


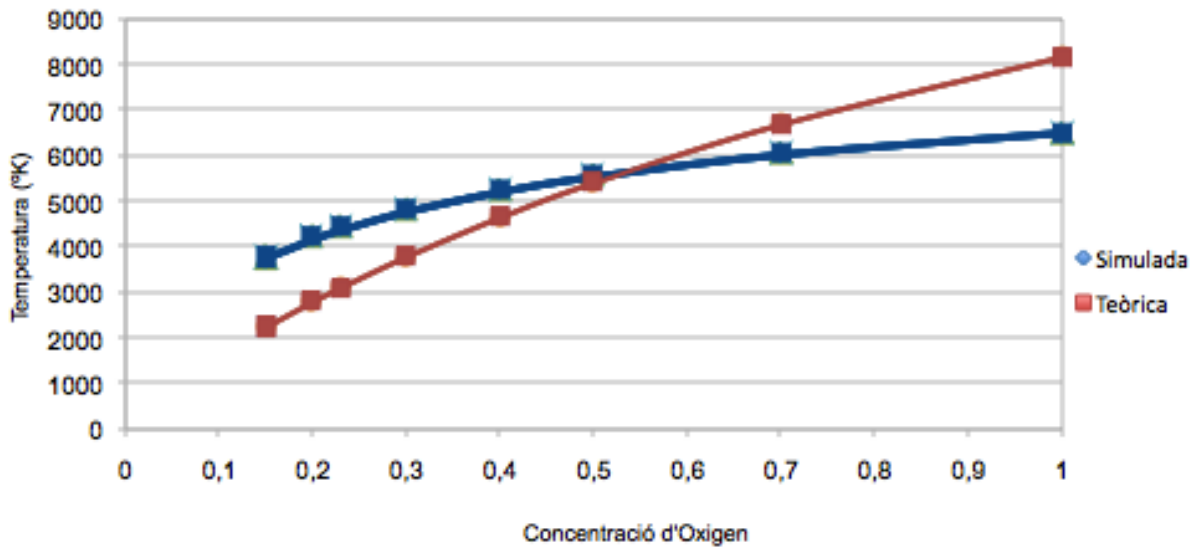
Figura 3.- Condicions Inicials del Cas 1

El cas 1 s'han obtingut simulacions amb diferents valors per a la concentració d'oxigen i també per a la velocitat del flux oposat.

## 5.2 Temperatura vs concentració d'oxigen

Primer, es durà a terme un conjunt de simulacions per a veure l'evolució de la temperatura màxima en funció de la concentració d'oxigen.

En el Gràfic 1 es pot observar com la temperatura màxima augmenta a mida que augmenta la concentració d'oxigen. Comparant els valors teòrics extrets de l'Eq 12 es veu que per concentracions petites el valor simulat està per sobre dels valors teòrics. A partir del 53% de concentració la temperatura de la flama simulada és més petita que la teòrica. A la Taula 2 es poden observar els valors de l'error en la determinació de la temperatura en funció de la concentració en volum d'oxigen.



Gràfic 1.- Temperatura en funció de la conentració en volum d'oxigen

X <sub>O2</sub>	Error en la determinació de la temperatura
0,15	41%
0,2	33%
0,23	29%
0,3	21%
0,4	11%
0,5	3%
0,7	11%
1	26%

Taula 2.- Error en la determinació de la temperatura

### 5.3 Comparació de les diferents concentracions

Tot seguit, es farà una anàlisi per veure ja diferència de flama que es genera per a diferents concentracions d'oxigen mantenint constant la velocitat del flux oposat.

- $v = 0,3 \text{ m/s}$  (velocitat del flux oposat)

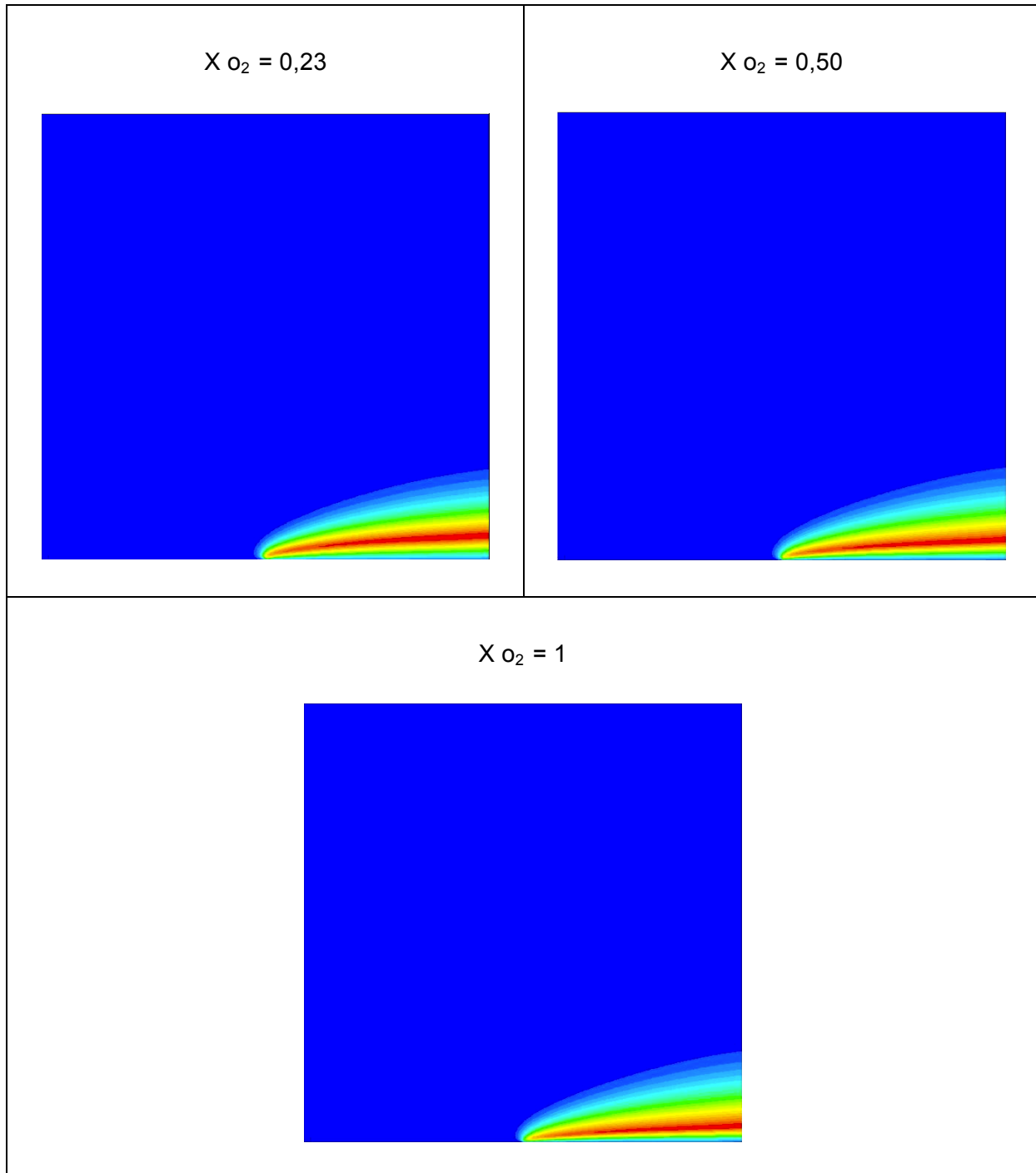


Figura 4.- Distribució de temperatura per diferents concentracions

- $v = 0,1$  m/s (velocitat del flux oposat)

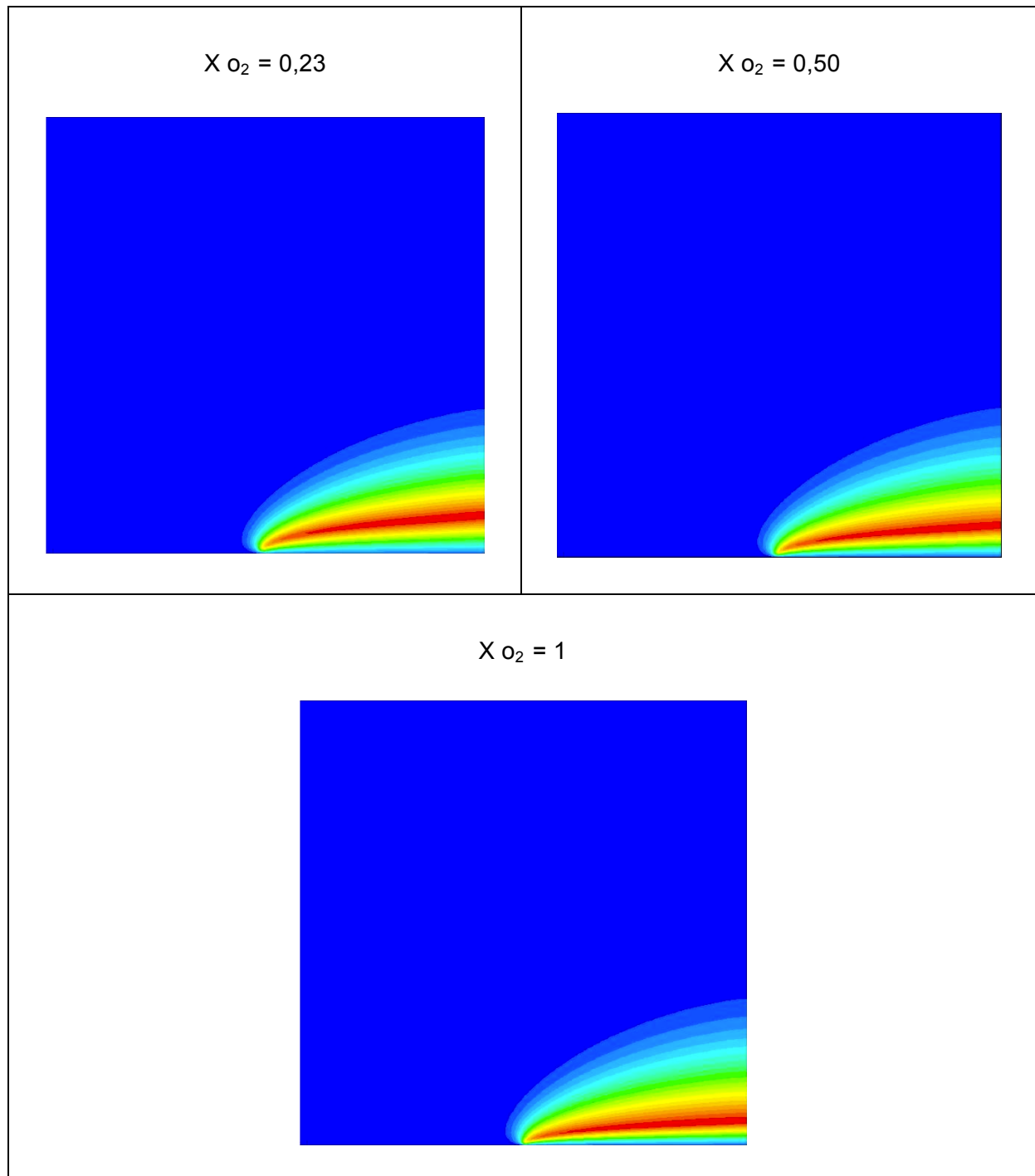


Figura 5.- Distribució de temperatura per diferents concentracions

Com es pot observar a les Figura 4 i Figura 5, el comportament de la flama simulada pateix una gran variació, ja que en la Figura 5 les flames són més amples degut a la baixa velocitat del vent. A la Figura 4, la forta intensitat del vent oposat fa que la flama estigui molt propera a la zona que ja ha fet la piròlisi.

## 6 RESULTATS CAS 2

### 6.1 Introducció

Aquí el model és transitori i, per tant, permet que la posició de la flama avanci i es pugui determinar la seva velocitat de propagació. Per això, en el cas 2 s'han realitzat diferents proves, com variar la concentració d'oxigen i la variació dels paràmetres cinètics, per estudiar les diferents velocitats de propagació de la flama i comparar-les amb les dades experimentals.

També s'ha realitzat el càlcul de límit d'extinció per a diferents concentracions d'oxigen i velocitats del flux oposat.

Com es pot observar a la Figura 6, en l'inici es diferenciaren dues zones dins l'experiment. La zona 1 serà el petit rectangle inferior i la zona 2 a la resta de la geometria.



Figura 6.- Geometria del cas 2

Les condicions inicials en aquest cas són les següents:

- La temperatura serà de 300 K a la zona 1, i de 1000 K a la zona 2.
- La concentració d'oxigen és nul·la a la zona 1 i constant (però variable segons l'experiment) a la zona 2.
- La concentració de fuel serà del 70% a la zona 1 i nul·la a la zona 2.

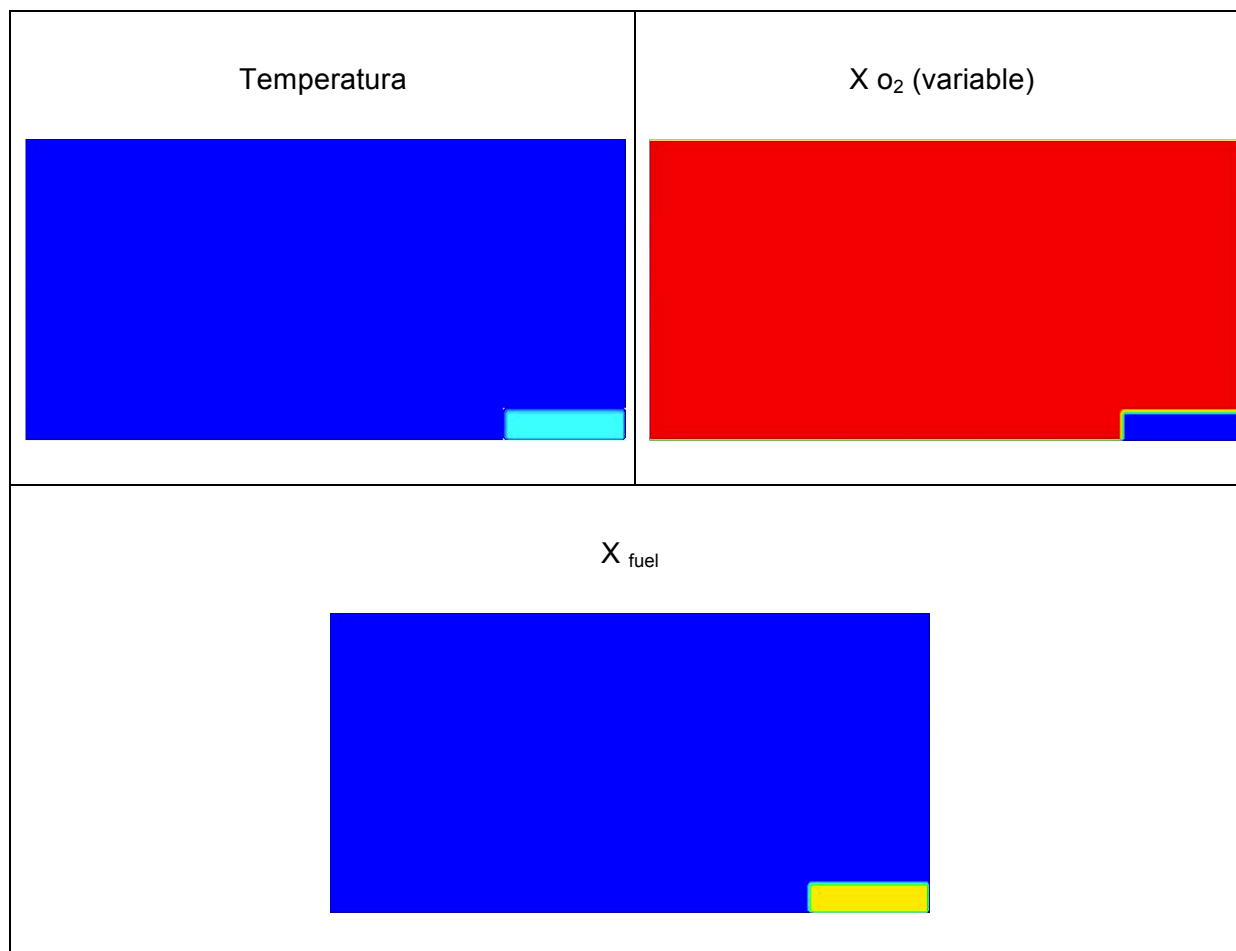


Figura 7.- Condicions inicials del cas 2

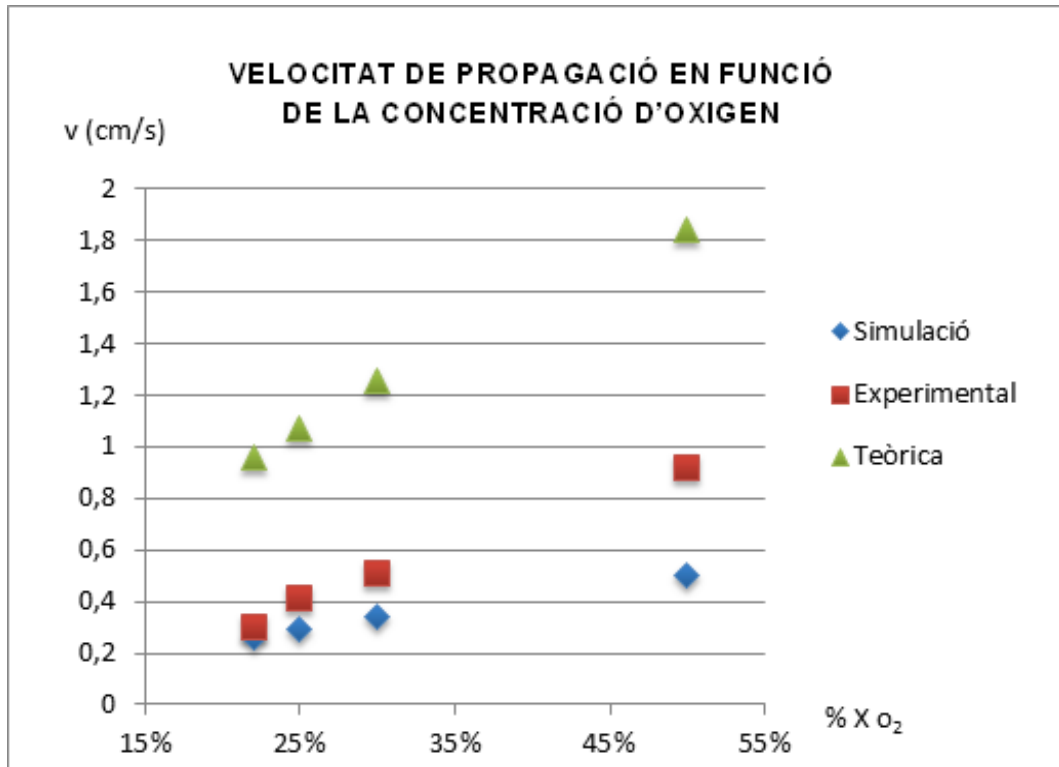
## 6.2 Velocitat de propagació en funció de la concentració oxigen

Mitjançant la nostra modificació del codi FLUENT, s'han realitzat les simulacions del procés de combustió amb les següents concentracions d'oxigen (en volum): 22%, 25%, 30% i 50%.

L'objectiu principal és obtenir les diferents velocitats de propagació associades a cada concentració mitjançant l'anàlisi dels resultats obtinguts. En el Gràfic 2 es poden observar les diferents velocitats (cm/s) de la flama obtingudes amb la prova experimental, mitjançant l'anàlisi teòric (de Ris) i finalment amb les dades aportades per la simulació.

Com a dades experimentals s'han utilitzat les descrites a l'apartat 2.4. Paral·lelament les dades teòriques s'han obtingut mitjançant l'aplicació de les Eq. 12 i Eq. 13.

Les dades de la velocitat de propagació de la flama de la simulació s'han obtingut a partir de l'estudi de la posició de l'extrem de la flama en funció del temps en les imatges creades amb el programa ANSYS FLUENT per a cada cas.



Gràfic 2.- Velocitat de propagació en funció de la concentració d'oxigen en volum

Com es pot observar, la simulació s'apropa més al valor experimental que al valor teòric, sobretot per a concentracions d'oxigen petites. En la Taula 3 es pot comprovar que per concentracions d'oxigen petites, l'error de la simulació és molt més petit que el de la part teòrica. A mesura que augmenta la concentració la diferència d'errors es va anivellant.

X <sub>O<sub>2</sub></sub>	Errors en la determinación de la velocitat de propagació	
	Simulació	Teòrics
0,22	14%	220%
0,25	29%	161%
0,3	34%	146%
0,5	46%	100%

Taula 3.- Errors en la velocitat de propagació de la flama de la simulació i la part teòrica respecte l'experimental

La simulació, per tant, millora la predicció analítica. Per a grans concentracions d'oxigen, però, la simulació subestima substancialment els resultats experimentals. Això pot ser degut a que la simulació no incorpora la velocitat dels volàtils a la superfície i, per tant, la flama queda enganxada a la superfície de piròlisi. Sense aquesta alçada de la flama, la transmissió de calor cap a la zona verge no és tan gran com l'experimental i, per tant, la velocitat de propagació de la flama simulada hauria de ser menor a la mesurada en el laboratori. Aquest efecte pot ser més important a mesura que s'augmenta la concentració

d'oxigen ja que la temperatura de la flama augmenta a mesura que augmentem la concentració d'oxigen i l'alçada de la flama és més gran a mesura que també augmentem la concentració d'oxigen. En la simulació no s'incorpora la velocitat a la superfície del paper ja que la condició de contorn del FLUENT no permet aquest efecte.

La variació de la velocitat de propagació en funció de la concentració d'oxigen també es pot veure a la Figura 8 on es pot observar en les diferències entre els gràfics de temperatures a la fase gas per a diferents concentracions inicials d'oxigen el mateix temps transcorregut i per a una mateixa condició inicial. Com podem veure, a mida que la concentració augmenta, més part de la cel·lulosa s'haurà cremat indicant que s'ha propagat més ràpidament.

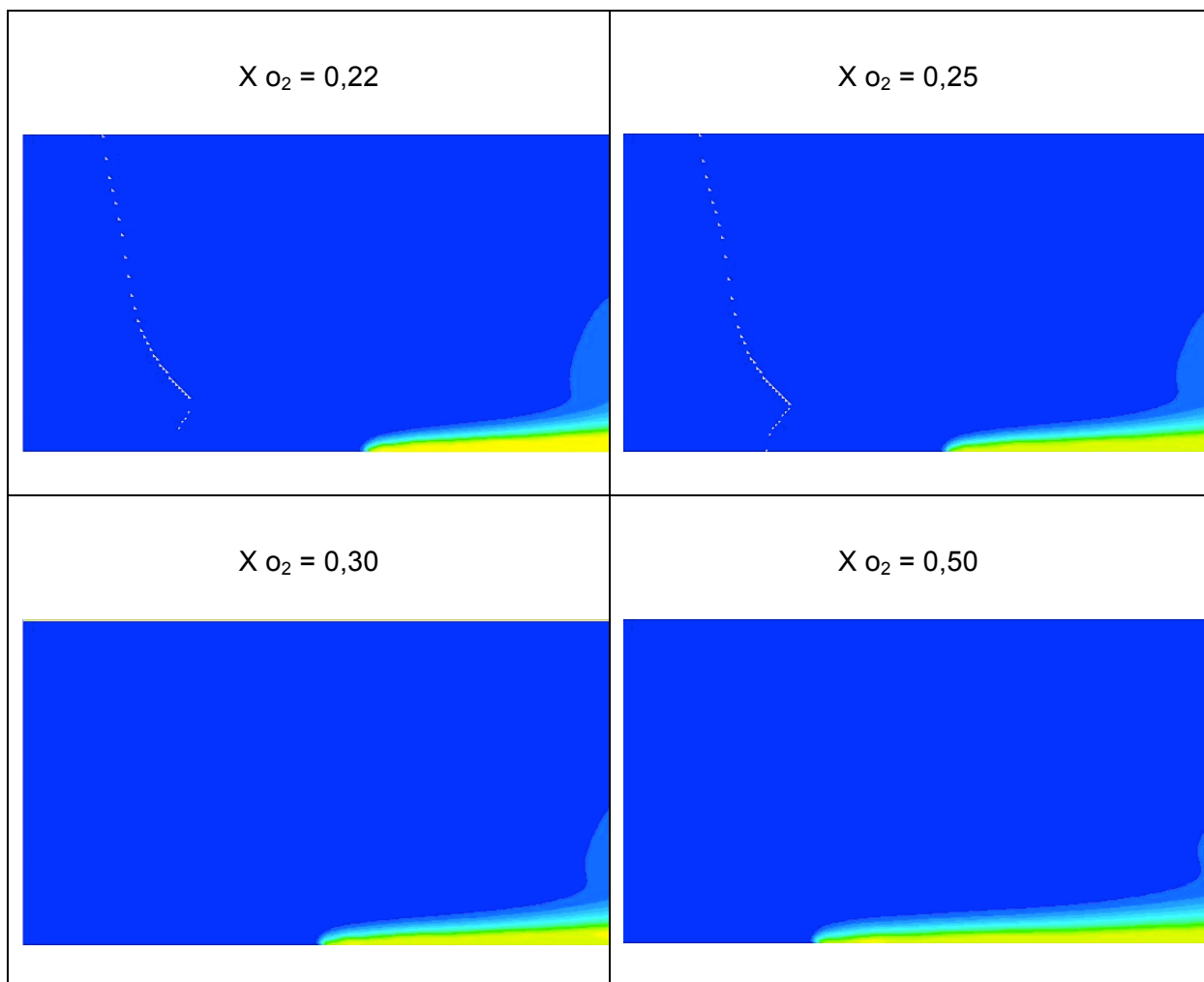


Figura 8.- Gràfic de temperatura de la cambra per diferents concentracions



### 6.3 Velocitat de propagació en funció dels paràmetres cinètics de l'equació de reacció de la combustió

La reacció de combustió es modela com una equació d'Arrhenius. Això és una simplificació important ja que la combustió a la fase gas és un procés molt complex. En aquesta equació d'Arrhenius hi intervenen dos termes com l'energia d'activació i el terme preexponencial. Alguns autors evaluen aquests dos termes per tal d'ajustar el model a les dades experimentals. En l'apartat anterior, hem agafat els valors d'energia d'activació ( $E_a$ ) i de terme preexponencial del gas ( $A$ ) com els de Wu (2003). En aquest apartat fem una sèrie de simulacions variant els paràmetres cinètics de l'equació de combustió per veure la sensibilitat del model als canvis en aquests paràmetres. Així, els paràmetres cinètics que es tractaran són:

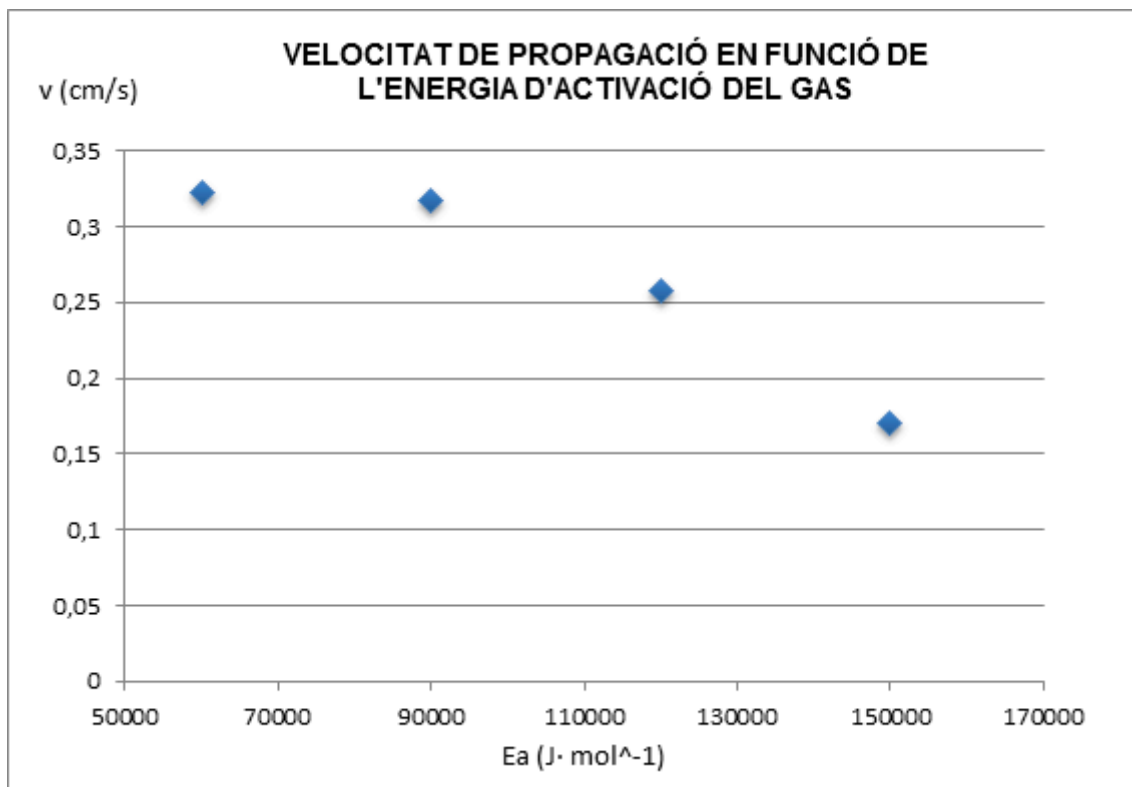
- L'energia d'activació del gas ( $E_a$ )
- El terme preexponencial del gas ( $A$ )

#### 6.3.1 Energia d'activació del gas ( $E_a$ )

El terme d'energia d'activació del gas és l'energia que necessita un sistema per iniciar un procés. És l'energia química mínima necessària per a l'inici de la reacció.

Per realitzar aquest estudi variarem aquest terme, que en l'experiment anterior era de 120000 ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ ), desde 60000 a 150000 ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) amb un increment constant de 30000 ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ ).

Al Gràfic 3 es pot observar com la velocitat disminueix a mesura que augmenta el valor de l'energia d'activació del gas tal i com és d'esperar. S'ha de tenir present que les simulacions del Gràfic 3 utilitzen els mateixos valors per a tots els altres paràmetres, amb una concentració inicial d'oxigen en massa de 24,3% que correspon a la concentració de 23% en volum. De la figura, s'observa que el valor utilitzat com a referència es troba en una regió amb elevada sensibilitat, de tal manera que una variació de l'energia d'activació comportarà una reducció de la velocitat de l'ordre de 0.1 cm/s per cada  $10^4 \text{ J mol}^{-1}$  que augmentem l'energia d'activació.

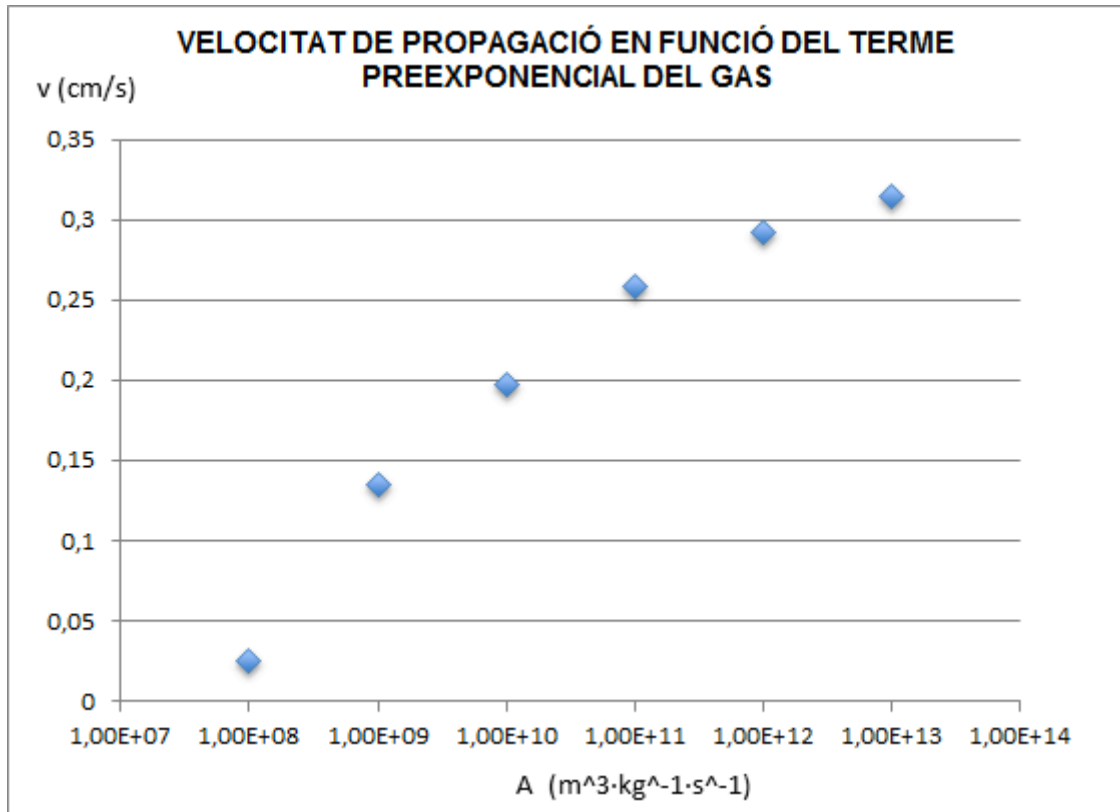


Gràfic 3.- Velocitat de propagació en funció de l'energia d'activació del gas. Cas per  $X_o=0,23$

### 6.3.2 Terme preexponencial del gas

En aquest cas s'ha variat el terme preexponencial del gas, que en el cas de referència utilitzat anteriorment és de  $1,58e11 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Aquí s'ha variat des de  $1e8 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$  fins a  $1e13 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

Com es pot observar al Gràfic 4, la velocitat de propagació augmenta a mesura que aquest valor es va fent gran. En aquest cas, el terme preexponencial de referència també es troba en una zona d'elevada sensibilitat. Per tot l'anterior, és molt important disposar d'uns valors per a l'equació d'Arrhenius de la fase gas que representin correctament la reacció de combustió. S'ha de tenir present que, a diferència de la fase sòlida on els termes preexponencial i energia d'activació es poden fàcilment obtenir de forma experimental, en la reacció de la fase gas, aquests dos termes són difícils d'obtenir.



Gràfic 4.- Velocitat de propagació en funció del terme preexponencial del gas. Cas amb  $X_o = 0,23$

## 6.4 Límits d'extinció

### 6.4.1 Reducció de la concentració d'oxigen

El següent experiment es basa en la reducció de la concentració d'oxigen des del seu valor normal de 22% fins a un valor en què la flama no es propagui. Aquest serà el límit d'extinció.

A l'anar disminuint la concentració d'oxigen de la flama, l'energia alliberada en la combustió es va reduint, la flama és menys vigorosa i amb menys temperatura i, per tant, la vaporització de la part verge del sòlid produïda per la transmissió de calor despresada per la flama és més difícil. Això fa que la velocitat de propagació es vagi reduint. Les simulacions que s'han fet reduint la concentració d'oxigen en intervals de l'1 % revelen que a l'arribar al 7% de concentració la velocitat de propagació és nul·la i per tant ens trobem al límit d'extinció. Aquest és un límit que es troba una mica per sota de l'esperat, que és de l'ordre del 15% en els experiments.

#### **6.4.2 Augment de la velocitat del flux oposat**

La flama també es pot extingir quan hi afegim un flux d'aire oposat al moviment de la flama. En aquest cas s'ha augmentat la velocitat del flux oposat per veure quina era la velocitat que ocasionava la no propagació de la flama. Tots els casos anteriors s'havien fet amb flux oposat nul tot i que la velocitat mai era zero al voltant de la flama degut als efectes convectius ocasionats per la diferència de densitats. A l'afegir un flux en direcció contrària fixem la velocitat que entra per la paret esquerra del cas 2. Després de fer diverses simulacions, en intervals de la velocitat oposada de 0.1 m/s, s'ha vist que per a un valor de 4,6 m/s ja no hi havia propagació de la flama. Aquest valor sembla ser, també, més gran del que s'espera (de l'ordre de 1 m/s segons alguns autors; West, 1998).

**7 RESUM DEL PRESSUPOST**

Amortització de la Maquinària		85,00 €
Mà d'Obra		3565,00€
	ΣSubtotal	3650,00 €
	IVA (21%)	766,50 €
	TOTAL	4416,50 €
	TOTAL	Quatre mil quatre-cents setze Euros amb cinquanta centims

Taula 4.- Resum del pressupost

## 8 CONCLUSIONS

El present projecte ha complert els objectius que es van marcar a l'inici del mateix. Els següents punts descriuen les conclusions extretes del projecte:

- L'elecció de la geometria correcta i del programa en C que fes funcionar el programa i la simulació d'una manera correcta no ha estat fàcil. S'han fet proves amb geometries de dos volums units, essent un el volum de gas i l'altre el volum de sòlid. Per a aquesta situació hi van haver bastants problemes per definir bé el programa en C i les condicions de contorn per a la paret que corresponia a la interfase entre el sòlid i la fase gas. Això va provocar la desestimació d'aquest cas per finalment realitzar la geometria amb un únic volum i posar la condicions de contorn adients a la paret inferior. Per tant, en l'estudi de sòlids prims amb Fluent no recomanem treballar amb una geometria formada per dos volums. Les característiques del sòlid les definim com a propietats d'un contorn i no d'un volum.
- El cas 1 que hem mostrat és un dels múltiples casos de prova que es van realitzar per poder estimar la capacitat del FLUENT per simular la combustió de sòlids prims. Aquest cas és estacionari i s'ha observat com la definició de les condicions de contorn a la superfície del sòlid per a la fracció màssica de fuel i d'oxigen mitjançant UDF són les adequades. Això és molt important ja que el FLUENT, per defecte, no permet incorporar condicions de contorn de tipus mixt (flux proporcional a la variable). Per tant, es recomana utilitza les UDF aquí utilitzades per aquests tipus de condicions de contorn. En el cas 1 s'han realitzat diferents simulacions per diferents concentracions i per diferents velocitats del flux oposat. S'han trobat els resultats esperats com que la temperatura augmenta a mesura que s'augmenta la concentració en massa d'oxigen. També s'ha pogut comprovar, que a l'augmentar la velocitat del flux oposat, la flama no se separa tant del paper.
- El cas 2 ha estat el cas en que s'ha profunditzat més en l'estudi ja que s'ha inclòs l'efecte transitori a partir d'una definició adequada del flux màssic. S'han realitzat diferents experiments, variant diferents valors per poder extreure'n conclusions.

- En l'experiment en què s'ha variat la concentració en massa d'oxigen per comprovar que la velocitat de propagació de la flama, s'observa que s'apropa bastant als resultats experimentals, sobretot per a concentracions petites.
- L'experiment en què s'han variat els paràmetres cinètics, s'ha comprovat que a l'augmentar el terme de l'energia d'activació del gas ( $E_a$ ) la velocitat de propagació disminueix; i a l'augmentar el terme preexponencial la velocitat disminueix, tal i com era d'esperar. S'ha determinat la sensibilitat de la solució a la variació en els paràmetres cinètics.
- Els experiments en què s'han buscat els límits d'extinció han estat una mica menys precisos ja que no s'apropaven tant a la realitat. El primer dels experiments en el que s'ha disminuït la concentració en massa d'oxigen per trobar en quin punt la flama no es propagava, s'ha trobat que la concentració era del 7% mentre que a la realitat estaria al voltant del 15%. El segon experiment es basava en l'augment de la velocitat del flux oposat fins trobar-ne la que no permetia la propagació. Aquesta velocitat ha estat del 4,6 m/s mentre que a la realitat estaria al voltant de 1 m/s
- Els treballs futurs que es poden realitzar com a continuació d'aquest projecte són molts ja que el programa i la creació de UDFs i UDSs proporciona un ample ventall de possibilitats i millores possibles. Entre elles:
  - La introducció dels efectes de la radiació en el sistema.
  - La introducció dels efectes de la velocitat del flux de piròlisi quan el flux màssic no és nul.

Javier Revert Peris

4/09/2012

## 9 RELACIÓ DE DOCUMENTS

Document 1: Memòria i Annexos

- Volum 1: Memòria
- Volum 2: Annexos



## 10 BIBLIOGRAFIA

- B.Comas, T.Pujol (2012). Experimental Study of the effects of side\_edge burning the lownward flame spread of thin solid fuels. *Combustion Science and Technology* , 184, 489-504.
- S. Bhattacharjee, M.D. King, C. Poolini, (2004). Structure of lownward spreading flames: a compresion of numerical simulation, experimental results and a simplified parabolic theory. *Combustion thero and modellling*. 8, 23-39.
- J. de Ris (1969). Spread of a laminar diffusion flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 12, 241-252.
- K.K. Wu, C.H. Chen (2003). A numerical analysis of ignition to steady downward flame spread over a thin solid fuel. *Combustion Science and Technology*, 175, 933-964.
- J.B. Greenberg, P.D. Ronney (1993). Analysis of Lewis number effects in flame spread. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36 (2), 315-323.
- J.S.West (1998). Forced opposed flow flame spread over flat solid fuels in the thermal, near quiscent and chemical kimetic regimes. Tesis doctoral University of California, San Diego.
- James G. Quintiere (2006). *Fundamentals of Fire Phenomenal*
- ANSYS, Inc (2010). *ANSYS FLUENT UDF Manual*
- ANSYS, Inc (2009). *ANSYS FLUENT 12.0 Tutorial Guide*
- ANSYS, Inc (2009). *ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide*
- ANSYS, Inc (2009). *ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide*

