

## The effect of the combustion model on the prediction of temperature and pressure fields in an anular combustor

**Gilberto Materano, Carlos Araujo, Numa Márquez y Alejandro Colman**

*Departamento de Energía, Escuela de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ingeniería, Universidad del Zulia. Maracaibo 4001-A, Venezuela. Telefax (0261) 7598794. gmaterano@gmail.com, araujocd@gmail.com*

### Abstract

A comparison of the temperature and pressure field obtained by the Adiabatic Chemical Equilibrium and the Generalized Finite Rate models, to simulate a twin-spool gas turbine's annular combustion chamber, is presented in this paper. The solution of the conservation equations was undertaken by using control volume method. In order to include the effect of the turbulence was used standard Kappa Epsilon model. The results obtained in this study show that the use of both models does not affect the pressure field prediction and the shape of the temperature profile at the outlet of the chamber. The same behavior is observed when the mass weighted temperature is calculated. For both models, this temperature was lower than the adiabatic flame temperature at the same operation conditions. By other hand, the most significant differences observed between the temperature fields given by both model, viewed in the axial and the exhaust plane, are observed when the variable reaches it maximum value.

**Key words:** Chemical equilibrium, generalize finite rate, combustion.

## Efecto del modelo de combustión en la predicción del campo de temperatura y presión de una cámara anular

### Resumen

Esta investigación tiene como objetivo comparar los campos de temperatura y presión predichos por los modelos: equilibrio químico adiabático y tasa finita generalizada, en una cámara de combustión anular de una turbina a gas de eje partido. La solución de las ecuaciones de conservaciones implementadas se obtiene usando el método de volumen finito, y a fin de incluir efectos de turbulencia se utiliza el modelo Kapa-Epsilon. De los resultados obtenidos, se concluye que la elección entre los modelo de combustión mencionados, no afecta la predicción del campo de presiones, ni la forma del perfil de temperatura a la salida de la cámara de combustión. Lo mismo se observa con el cálculo de la temperatura ponderada en masa a la salida, la cual estuvo por debajo de la temperatura de flama adiabática, calculada para las mismas condiciones de prueba. Por otra parte, las mayores desviaciones cuantificadas en el campo de temperatura, vistos en el plano longitudinal y de salida, se presentan en las regiones donde esta variable escalar alcanza su máximo valor.

**Palabras clave:** Equilibrio químico, tasa finita generalizada, combustión.

## Introducción

En este trabajo se comparan los campos de temperatura y presión obtenidos mediante dos modelos de combustión. El primero es el de Fracción de Mezcla/PDF bajo una condición de equilibrio químico, que permite obtener una relación entre la fracción de mezcla y los campos escalares, minimizando el número de ecuaciones de transporte a resolver, para casos de llamas no premezcladas. El segundo modelo es el de tasa finita generalizada, el cual requiere la solución de una ecuación de transporte para cada especie química considerada. Debido a su naturaleza, este modelo puede ser implementado para problemas de combustión, donde los reactantes pueden estar premezclados o no.

De la revisión bibliográfica, resalta la evaluación de un horno cilíndrico, bajo condiciones de simetría axial, en donde se demostró que, el campo de temperatura obtenido con el modelo de tasa finita generalizada, presenta un mejor ajuste a la data experimental pero con un costo computacional elevado, en comparación con el modelo de fracción de mezcla/PDF basado en una condición de equilibrio químico [1]. Por su parte, el modelo de fracción de mezcla/PDF ha sido implementado exitosamente en el análisis de procesos de combustión en edificaciones, a fin de mejorar sistemas de protección contra incendio [2]. Por tal motivo, el objetivo de la investigación es establecer la influencia que tiene la elección de los modelos en la simulación de cámaras de combustión anulares de turbinas a gas, donde la evaluación experimental es una tarea difícil y costosa.

El modelo numérico es obtenido mediante el método de volumen finito aplicado a un dominio tridimensional. Las ecuaciones de conservación son resueltas bajo dos modalidades. En el primer caso, los campos escalares dependen de la fracción de mezcla y una función probabilística conocida como PDF (función densidad probabilidad), la cual es estimada utilizando una forma  $\beta$  supuesta, bajo una condición de equilibrio químico. La segunda manera consiste en utilizar el modelo de tasa finita generalizada, restringiendo el proceso de combustión a dos pasos de reacción.

Para considerar la interacción química turbulenta, en ambos casos, se implementó el modelo el modelo kappa-epsilon [3], el cual ha sido

extensamente usado por brindar una buena aproximación del proceso de forma simple [1, 4].

En el caso de estudio, los modelos serán utilizados bajo una misma condición. No obstante, es de esperar cierta discrepancia en los resultados obtenidos, tomando como base que son de distinta naturaleza [5].

## Parte Experimental

### Descripción del problema

La cámara de combustión anular estudiada es utilizada para incrementar la temperatura del fluido de trabajo de una turbina a gas, de eje partido, y su configuración geométrica, además de sus componentes, se presentan en la Figura 1. La inyección de combustible se realiza por las diferentes tomas, ubicadas alrededor de la cámara, en su parte externa inferior. Ésta es de tipo dual ya que puede utilizar combustible líquido y gas. Para reducir el costo computacional fue seleccionado un dominio con periodicidad que comprende 1/10 de la cámara de combustión como se muestra en la Figura 2, en donde se aprecia la malla implementada.

Los parámetros de operación que se utilizarán en la simulación de la cámara de combustión fueron obtenidos de mediciones realizadas en campo, bajo la condición de operación nominal. El oxidante fue considerado como aire atmosférico con una humedad relativa del 60% y un flujo de masa de 16.8 kg/seg, el cual, luego del proceso de compresión alcanza una temperatura de 620 K. Así mismo, el combustible se consideró metano, a una temperatura de entrada 298 K y un flujo de masa de 0.19 kg/seg. Los reactantes entran a la cámara a una presión de operación de 888 kPa.

Finalmente, la discretización del dominio se realizó con mallas de densidad de celdas creciente, hasta alcanzar 116.575 celdas, con lo cual se obtuvo discrepancias en el campo de temperatura, inferiores al 10%. Sobre esta se imponen las siguientes condiciones de borde: flujo másico de entrada conocido, tanto para el aire como el combustible, condición *outflow* para la salida de los productos de combustión, paredes perfectamente aisladas y condición periódica en los planos de simetría.

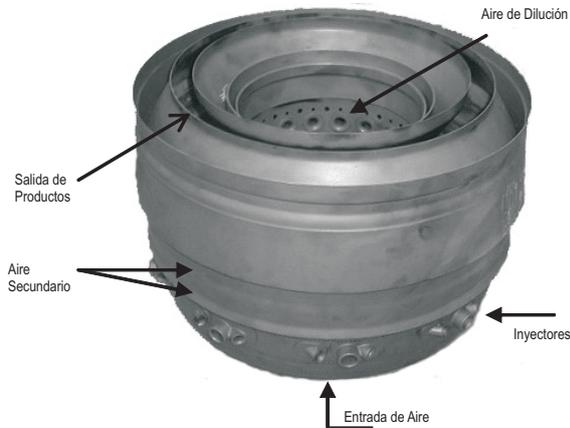


Figura 1. Cámara de combustión anular de turbina a gas (de eje partido).

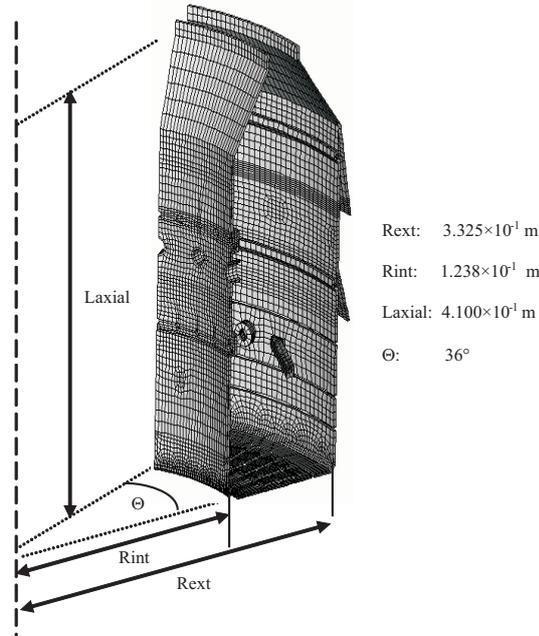


Figura 2. Representación de dominio de cálculo y malla.

## Modelo Matemático

### Campo de flujo turbulento

Para obtener el campo de flujo se procede a resolver la ecuación de conservación de masa (1) y cantidad de movimiento (2), mostradas a continuación:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \tilde{u}_i' u_j') \quad (2)$$

donde: los esfuerzos de Reynolds turbulentos  $\bar{\rho} \tilde{u}_i' u_j'$ , de la ecuación (2), pueden ser modelados mediante la aproximación de Boussinesq [5, 6].

### Modelo de equilibrio químico

El criterio de equilibrio químico, se basa en la implementación de la función de energía libre de Gibbs (3), que para una mezcla de N especies, puede ser expresada en función de la masa de la mezcla mediante:

$$g = \sum_{j=1}^N \mu_j n_j^* \quad (3)$$

Al minimizar la Función de Gibbs, para un estado termodinámico dado, se alcanza una condición de equilibrio única, en donde la entropía es máxima, que define la composición de la mezcla.

### Aproximación PDF

El cálculo de la concentración de cada una de las especies presentes en el proceso de combustión, puede hacerse resolviendo sus respectivas ecuaciones de conservación escalar. Sin embargo, el modelo de equilibrio químico se apoya en la implementación de la fracción de mezcla y de las funciones PDF.

La fracción de mezcla es una cantidad escalar conservativa y su valor se obtiene mediante una relación de escalares pasivos (Z), los cuales pueden cambiar producto de la difusión o convección, pero no por efecto de la reacción [5], como se define en la ecuación (4).

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad (4)$$

Los campos escalares son resueltos mediante la integración de la ecuación (5), la cual depende del criterio de equilibrio químico [5, 6].

$$\bar{\rho} \tilde{\phi}_i = \int_0^1 \rho \phi_i^e(f) p(f) df \quad (5)$$

A su vez, la función de densidad de probabilidad (PDF) ponderada en masa, se obtiene utilizando la forma  $\beta$  supuesta mostrada en la ecuación (6).

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int_0^1 f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1} df} \quad (6)$$

El término  $\alpha$  y  $\beta$  se calculan mediante expresiones que requieren la solución de las ecuaciones de conservación escalar (7) y (8).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \tilde{f}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_i} \frac{\partial}{\partial x} \tilde{f} \right) \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{f}'^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \tilde{f}'^2) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_i} \frac{\partial}{\partial x} \tilde{f}'^2 \right) + \\ C_g \mu_t \frac{\partial \tilde{f}'^2}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{f}'^2}{\partial x_i} - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \tilde{f}'^2 \end{aligned} \quad (8)$$

donde  $\sigma_i$ ,  $C_d$  y  $C_g$  son constantes que adquieren el valor de 0.85, 2 y 2.86 respectivamente.

### Modelo de tasa finita generalizada

Este modelo se caracteriza por obtener los campos escalares de cada una de las especies químicas, resolviendo  $N-1$  ecuaciones de conservación escalar, tal como la mostrada en la ecuación (9), en conjunto con la ecuación de conservación de masa total, donde  $N$  representa el número de especies químicas presentes en la reacción.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} - \bar{\rho} \tilde{u}_i Y''_k \right) \\ &+ \bar{\omega}_k \quad \text{Para } k = 1, N \end{aligned} \quad (9)$$

En tal sentido, es necesario precisar cuales especies son predominantes en el proceso de combustión. Esto se logra, definiendo de forma previa los pasos de reacción presentes; en este caso, para el metano se estableció de la siguiente forma [7]:



Una desventaja del método es apreciada cuando un número significativo de pasos de

reacción es seleccionado, esto incrementa el número de ecuaciones de conservación a resolver, que en algunos casos no tiene relevancia en los campos escalares estudiados.

### Campo adimensional de temperatura

A fin de comparar los resultados obtenidos para el campo de temperatura, se define la variable adimensional  $\theta_T$ . Éste es calculado mediante la ecuación (12).

$$\theta_T = \frac{T_{fm} - T_{yf}}{T_{fa} - T_{ox}} \quad (12)$$

Este número normaliza la desviación en la predicción del valor de temperatura del modelo de fracción de mezcla respecto al modelo de tasa finita generalizada, en relación a un salto térmico de referencia, el cual es obtenido mediante la diferencia entre la temperatura de flama adiabática, evaluada a las condiciones de prueba del equipo y la temperatura del aire a la entrada.

### Campo adimensional de presión

Un parámetro significativo en el diseño de cámara de combustión para turbinas a gas consiste en minimizar las pérdidas de presión que ocurren en ésta, con el objeto de poder obtener una mayor expansión del fluido en la turbina, lo que se traduce en un incremento del trabajo específico.

La solución numérica de las ecuaciones de cantidad de movimiento para ambos modelos requiere el conocimiento del campo de presiones. En tal sentido, una medida de comparación del comportamiento hidrodinámico, ofrecida por los modelos implementados, puede ser obtenida, basándose en las diferencias de presión de estancamiento predichas, respecto a la presión de estancamiento a la entrada, tal y como se presenta en la siguiente expresión:

$$\theta_p = \left( \frac{P_{fm} - P_{tf}}{P_{ox}} \right) \times 100 \quad (13)$$

Finalmente, la caída de presión para la cámara anular evaluada, debe estar entre 4% y 7%, respecto a la presión de estancamiento a la entrada [8].

### Resultados

Los resultados mostrados a continuación fueron obtenidos considerando como especies relevantes: metano (CH<sub>4</sub>), oxígeno (O<sub>2</sub>), nitrógeno (N<sub>2</sub>), agua (H<sub>2</sub>O), dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H<sub>2</sub>). Bajo las condiciones descritas, los resultados obtenidos usando los modelos de Tasa Finita Generalizada y Equilibrio Químico Adiabático requieren de 600 iteraciones (1,2 h) y 527 iteraciones (0.48 h) respectivamente, en una máquina Intel Centrino Duo, 1.83 Ghz, 1 GB RAM, cuando el criterio de convergencia utilizado para todas las ecuaciones de conservación fue de  $1 \times 10^{-4}$ .

A fin de mostrar el comportamiento hidrodinámico de la cámara se muestra en la Figura 3 las líneas de trayectorias obtenido con el modelo de Tasa Finita Generalizada. Puede observarse la dilución de llama, la entrada de aire secundario y el giro que se impone en la corriente en la sección de entrada de la cámara.

Para poder comparar entre el modelo de equilibrio químico y el modelo de tasa finita generalizada, se procede a seleccionar un corte longitudinal de la cámara de combustión, que divide la sección simétrica analizada en dos partes iguales.

En la Figura 4 se presenta el campo adimensional de temperaturas definido por la ecuación (11). El valor de esta variable es positivo prácticamente en todo el dominio, lo que significa una sobreestimación en la predicción del campo

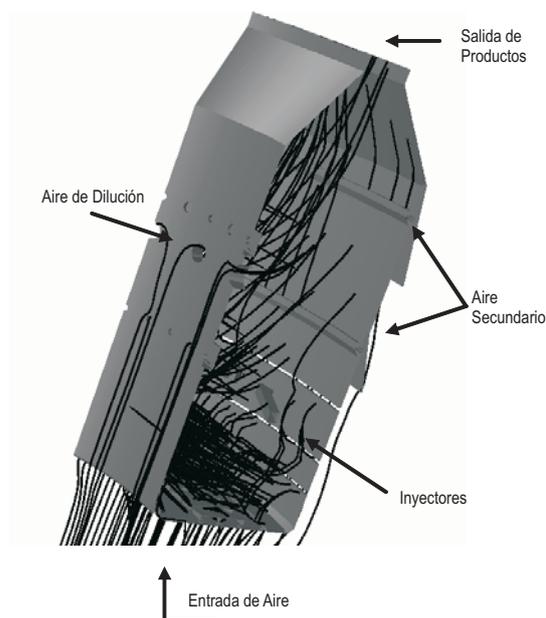


Figura 3. Líneas de trayectorias en la sección anular estudiada.

de temperatura por el modelo de fracción de mezcla, respecto al modelo de tasa finita generalizada. Nótese que en la zona de reacción, en donde se encuentra las mayores temperaturas, se alcanza la máxima desviación, de 90% del salto térmico de referencia, equivalente a 420 K.

Es importante resaltar, que en la zona de entrada del cesto combustor la desviación es nula, por encontrarse aguas arriba del proceso de reacción. Respecto a la salida de los productos observada en la sección longitudinal, la desvia-

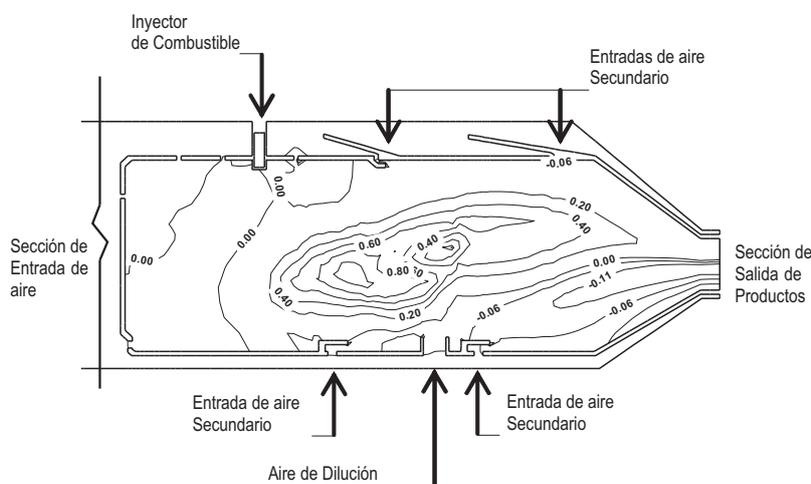


Figura 4. Campo adimensional de temperatura en el plano longitudinal.

ción es de  $-11\%$ , lo que conduce a una subestimación del modelo de fracción de mezcla de 51 K, respecto a tasa finita generalizada. No obstante, el detalle de la sección transversal a la salida del cesto combustor presentada en la Figura 5, revela que existe una zona caliente en dicho plano, donde una sobreestimación del modelo de fracción de mezcla es observada, hacia las zonas de mayor temperatura la cual alcanza  $30\%$  (140 K).

La Figura 6, muestra que los modelos de combustión implementados predicen la misma forma para el perfil de temperatura extraído sobre el radio medio. Esta información es de utilidad para el diseño de la primera etapa de expansión de la turbina, a fin de lograr un balance apropiado entre esfuerzos térmicos y dinámicos a la que están sometidos los alabes [8].

Respecto al valor de temperatura promedio a la salida ponderada en masa, la predicción de tasa finita generalizada y fracción de mezcla, fue 1081.78 K y 1074.51 K respectivamente. Al aplicar la ecuación (11) sobre la base de estos datos globales, la desviación es tan solo de  $1.5\%$ , es decir, bajo este enfoque global, el resultado es prácticamente independiente de la elección del modelo realizado.

Por otra parte, la Figura 7 muestra una comparación de las desviaciones observadas en el campo de presiones, calculada sobre la base de la ecuación (12).

Claramente se observa, una desviación de los modelos máxima de  $0.02\%$  lo que equivale a 178 Pa. En consecuencia, cuando el objeto de es-

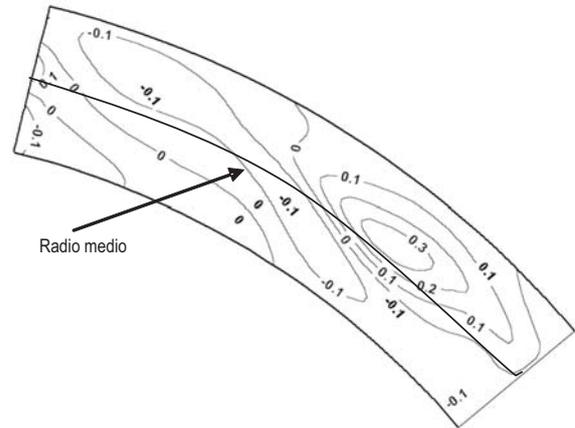


Figura 5. Campo adimensional de temperatura en el plano transversal de salida.

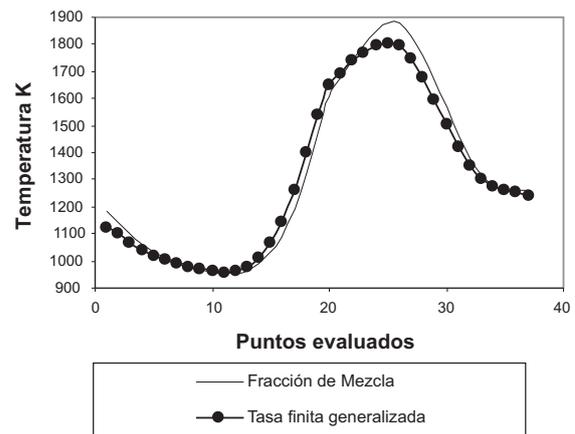


Figura 6. Perfil de temperatura en el plano de salida evaluado en el radio medio de la sección.

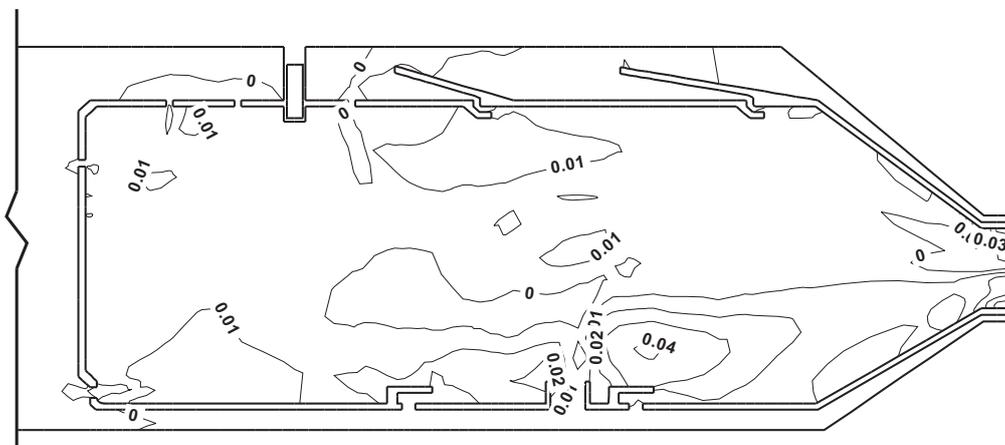


Figura 7. Campo adimensional de presiones.



**Símbolos griegos:**

- $\varnothing_i$  : Cantidad escalar  $i$   
 $\varepsilon$  : Tasa de disipación cinético turbulenta  
 $\theta_p$  : Variable adimensional de presión  
 $\theta_T$  : Variable adimensional de temperatura  
 $\kappa$  : Energía cinética turbulenta  
 $\mu$  : Potencial químico/viscosidad dinámica  
 $\rho$  : Densidad  
 $\tau_{ij}$  : Esfuerzo tensor  
 $\dot{\omega}_k$  : Término fuente de la ecuación de conservación escalar  
 $\Theta$  : Ángulo de la sección anular de la cámara estudiada

**Signos diacríticos:**

- : Cantidad ponderada en el tiempo  
 ~ : Cantidad ponderada por masa

**Superíndices:**

- e : Condición de equilibrio químico  
 " : Cantidad fluctuante ponderada por Favre  
 $\alpha, \beta$  : Parámetros que definen la forma  $\beta$  de la función de densidad de probabilidad

**Subíndices:**

- $i$  : especie  
 $ox$  : condición a la entrada del oxidante  
 $fuel$  : condición a la entrada del combustible  
 $fm$  : Fracción de mezcla  
 $tf$  : Tasa finita generalizada  
 $fa$  : Flama adiabática

**Referencias Bibliográficas**

1. Nieckele Angela, Naccache Mónica, Gomes Marcos, Carneiro João, Serfaty Ricardo (2001) Models Evaluations of Combustion Process in a Cylindrical Furnace ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, November 11-16, New York, USA.
2. Mc Grattan Kevin y Floyd Jason (2001) A Mixture Fraction Combustion Model for Large Scale Fire Modeling ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, November 11-16, New York, USA.
3. Launder, B. and Spalding, D. (1972) Mathematical Models of Turbulence, Academic Press Inc. London, England.
4. Viada, S. (1990) Simulación de una Cámara Axisimétrica de Combustión, Trabajo de Ascenso, Facultad de Ingeniería, Universidad del Zulia, Maracaibo, Venezuela.
5. Thierry Poinso, Denis Veynante (2001). Theoretical and Numerical Combustion, Edwards, Philadelphia, USA.
6. Kuo, K. (1986). Principles of Combustion. John Wiley and Sons, New York.
7. Yunus A. Cengel and Michael A. Boles (2006). Thermodynamics, and Engineering Approach, Fif<sup>th</sup> Edition, Mc Graw Hill, New York.
8. Herb Savaranamuttoo (20) Gas Turbine Theory, 5<sup>th</sup> Edition, Prentice Hall.

Recibido el 06 de Mayo de 2007

En forma revisada el 28 de Abril de 2008