



Universidad de Valladolid



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID
ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES
Grado en Ingeniería Mecánica

**ANÁLISIS DE LAS EMISIONES
DE UN QUEMADOR DE METANO
CON FLUJO ROTANTE
MEDIANTE CFD**

Autor:

García García, Luis Miguel

Tutor:

Parra Santos, M^a Teresa

Dpto. Ingeniería Energética y Fluidomecánica

Valladolid, 2016

Quisiera dedicar este trabajo a mis padres, mi hermana y mi novia por creer en mí desde el primer día de esta andadura. A mis amigos por todo su apoyo. También a mi tutora que gracias a su dedicación y constancia se pudo sacar adelante este trabajo.

A todos ellos muchas gracias.

Acrónimos

CFD (Computational Fluid Dynamics)

DNS (Direct Numerical Simulation)

LES (Large Eddy Simulation)

RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)

PDF (Probability Density Function)

ED (Eddy-Dissipation)

EDC (Eddy-Dissipation Concept)

RNG (Re-Normalization Group)

PVC (Precessing Vortex Core)

ZRI (Zona de Recirculación Interior)

ZRE (Zona de Recirculación Exterior)

MFV (Mixture Fraction Variance)

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS.....	17
1.1. PRESENTACIÓN.....	19
1.2. JUSTIFICACIÓN.....	19
1.3. OBJETIVOS.....	21
MODELO FÍSICO Y NUMÉRICO.....	23
2.1. INTRODUCCIÓN.....	25
2.2. MODELO FÍSICO.....	25
2.2.1. GEOMETRÍA DEL QUEMADOR.....	25
2.2.2. NÚMERO DE SWIRL.....	26
2.2.3. CARACTERÍSTICAS DE LA MALLA.....	27
2.3. MODELO NUMÉRICO.....	28
2.3.1. INTRODUCCIÓN.....	28
2.3.2. SOFTWARE Y HARDWARE.....	28
2.3.3. CONDICIONES DE CONTORNO.....	29
2.3.4. MODELADO DE TURBULENCIA.....	30
2.3.4.1. RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes).....	30
2.3.5. MODELADO DE LA COMBUSTIÓN.....	32
2.3.5.1. PDF (Probability Density Function).....	32
2.3.6. MODELADO DE LAS EMISIONES CONTAMINANTES.....	33

LLAMA ESTEQUIOMÉTRICA.....	35
3.1. INTRODUCCIÓN.....	37
3.2. ANÁLISIS DE LA TEMPERATURA.....	37
3.3. ANÁLISIS DE LA VELOCIDAD.....	39
3.3.1. VELOCIDAD AXIAL.....	40
3.3.2. VELOCIDAD TANGENCIAL.....	42
3.4. ANÁLISIS DE EMISIONES E INQUEMADOS.....	43
3.4.1. EMISIONES DE CO ₂	45
3.4.2. EMISIONES DE CO.....	46
3.4.3. EMISIONES DE NO _x	47
3.4.3.1. EMISIONES DE NO.....	48
3.4.3.2. EMISIONES DE N ₂ O.....	50
ANÁLISIS PARAMÉTRICO.....	51
4.1. INTRODUCCIÓN.....	53
4.2. LLAMA RICA (DOSADO $\Phi=1.2$).....	53
4.3. LLAMA POBRE (DOSADO $\Phi=0.8$).....	56
4.4. INFLUENCIA DEL DOSADO.....	60
4.4.1. INFLUENCIA SOBRE LA TEMPERATURA.....	60
4.4.2. INFLUENCIA SOBRE LA VELOCIDAD.....	62
4.4.2.1. VELOCIDAD AXIAL.....	63
4.4.2.2. VELOCIDAD TANGENCIAL.....	65
4.4.3. INFLUENCIA SOBRE LAS EMISIONES E INQUEMADOS	66
4.4.3.1. EMISIONES DE CO ₂	69

4.4.3.2. EMISIONES DE CO.....	71
4.4.3.3. EMISIONES DE NOx.....	73
CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS.....	79
5.1. INTRODUCCIÓN.....	81
5.2. CONCLUSIONES GENERALES.....	81
5.3. TRABAJOS FUTUROS.....	82
BIBLIOGRAFÍA.....	85
ANEXOS.....	89

LISTA DE ILUSTRACIONES

Figura 1. 1 Consumo de energía mundial en el 2014. Fuente: [www.bp.com, 2015].....	20
Figura 2. 1 Quemador de Roback y Johnson. Fuente: [Parra, 2015].....	26
Figura 2. 2 Dominio físico discretizado.....	27
Figura 3. 1 Contorno de temperaturas.....	38
Figura 3. 1 Perfiles de Temperatura (Gráfica a): $z=-0.005m$ $z=0.005m$ $z=0.025m$, Gráfica b): $z=0.05m$ $z=0.1m$ $z=0.15m$ Gráfica c): $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$).....	39
Figura 3. 3 Contornos de la velocidad axial.....	40
Figura 3. 2 Perfiles de Velocidad Axial (Gráfica a): $z=-0.005m$ $z=0.005m$ $z=0.025m$, Gráfica b): $z=0.05m$ $z=0.1m$ $z=0.15m$ Gráfica c): $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$).....	41
Figura 3. 3 Perfiles de Velocidad Tangencial (Gráfica a): $z=-0.005m$ $z=0.005m$ $z=0.025m$, Gráfica b): $z=0.05m$ $z=0.1m$ $z=0.15m$ Gráfica c): $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$).....	42
Figura 3. 6 Contornos de la Fracción másica de CH_4	43
Figura 3. 7 Perfiles de Fracción másica de CH_4 (Gráfica a): $z=-0.005m$ $z=0.005m$ $z=0.025m$, Gráfica b): $z=0.05m$ $z=0.1m$ $z=0.15m$ Gráfica c): $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$).....	44
Figura 3. 8 Contornos de la Fracción másica de CO_2	45
Figura 3. 9 Perfiles de Fracción másica de CO_2 ($z=0.15m$ $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$).....	45
Figura 3.10 Contornos de la Fracción másica de CO.....	46
Figura 3. 11 Perfiles de Fracción másica de CO (Gráfica a): $z=-0.005m$ $z=0.005m$ $z=0.025m$, Gráfica b): $z=0.05m$ $z=0.1m$ $z=0.15m$ Gráfica c): $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$).....	47

Figura 3. 12 Mecanismos de formación de NO _x [Fluent, 2009].....	48
Figura 3. 13 Perfiles de Fracción másica de NO (Gráfica a): z=-0.005m z=0.005m z=0.025m, Gráfica b): z=0.05m z=0.1m z=0.15m Gráfica c): z=0.2m z=0.3m z=0.4m).....	49
Figura 3. 14 Perfiles de Fracción másica de N ₂ O (Gráfica a): z=-0.005m z=0.005m z=0.025m, Gráfica b): z=0.05m z=0.1m z=0.15m Gráfica c): z=0.2m z=0.3m z=0.4m).....	50
Figura 4. 1 Contornos de Velocidad Axial para $\Phi=1.2$	54
Figura 4. 2 Perfiles de Velocidad Axial para $\Phi=1.2$	54
Figura 4. 3 Contornos de Temperaturas para $\Phi=1.2$	55
Figura 4. 4 Perfiles de Temperaturas para $\Phi=1.2$	55
Figura 4. 5 Contornos de Fracción másica de CH ₄ para $\Phi=1.2$	56
Figura 4. 6 Perfiles de Fracción másica de CH ₄ para $\Phi=1.2$	56
Figura 4. 7 Contornos de Velocidad Axial para $\Phi=0.8$	57
Figura 4. 8 Perfiles de Velocidad Axial para $\Phi=0.8$	57
Figura 4. 9 Contornos de Temperaturas para $\Phi=0.8$	58
Figura 4. 10 Perfiles de Temperaturas para $\Phi=0.8$	58
Figura 4. 11 Contornos de Fracción másica de CH ₄ para $\Phi=0.8$	59
Figura 4. 12 Perfiles de Fracción másica de CH ₄ para $\Phi=0.8$	59
Figura 4. 13 Contornos de Temperatura (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	61
Figura 4. 14 Perfiles de Temperatura (Gráfica a) lz=-0.005m, Gráfica b) lz=0.025m, Gráfica c) lz=0.15m, Gráfica d) lz=0.4m).....	62
Figura 4. 15 Contornos de Velocidad Axial (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	63

Figura 4. 16 Perfiles de Velocidad Axial (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$).....	64
Figura 4. 17 Perfiles de Velocidad Tangencial (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$).....	65
Figura 4. 18 Contornos de Fracción másica CH_4 (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	67
Figura 4. 19 Perfiles de Fracción másica de CH_4 (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$).....	68
Figura 4. 20 Contornos de Fracción másica de CO_2 (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	69
Figura 4. 20 Perfiles de Fracción másica de CO_2 (Gráfica a) $l_z=0.15m$, Gráfica b) $l_z=0.4m$).....	70
Figura 4. 22 Contornos de Fracción másica de CO (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	71
Figura 4. 23 Perfiles de Fracción másica de CO (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$).....	72
Figura 4. 24 Contornos de Fracción másica de NO (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	74
Figura 4. 25 Perfiles de Fracción másica de NO (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$).....	75
Figura 4.26 Contornos de Fracción másica de N_2O (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$).....	76
Figura 4. 27 Perfiles de Fracción másica de N_2O (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$).....	77

LISTA DE TABLAS

Tabla 2. 1 Particiones de la malla.....	27
Tabla 2. 2 Estadísticas colectivas de las particiones de la malla.....	27
Tabla 2. 3 Condiciones de contorno de entrada.....	29
Tabla 2. 4 Modelos de turbulencia [Fluent, 2009].....	31
Tabla 4. 1 Condiciones de contorno de entrada para $\Phi=1.2$	53
Tabla 4. 2 Condiciones de contorno de entrada para $\Phi=0.8$	56
Tabla 4. 3 Partes por millón de CO_2	70
Tabla 4. 4 Partes por millón de CO	73
Tabla 4. 5 Partes por millón de NO	74
Tabla 4. 6 Partes por millón de N_2O	76



[INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS]

1.1. PRESENTACIÓN

Este primer capítulo introduce los objetivos de este Trabajo Fin de Grado (TFG) y los motivos de su desarrollo. Se incluirán en este capítulo los objetivos que se persiguen y la estructura del contenido.

El presente trabajo se basa en el análisis mediante CFD de la combustión de CH_4 en una cámara de combustión. El aire se introduce en la cámara de combustión con una componente tangencial como en los experimentos iniciados por Roback y Johnson [Roback, 1983]. En dichos experimentos la combustión en este tipo de quemadores lograba confinar la llama en un espacio pequeño mediante las recirculaciones que se producen dentro de la cámara de combustión. Se consigue así una llama mucho más estable y menor tiempo de residencia lo que disminuye las emisiones de CO_2 y NO_x .

1.2. JUSTIFICACIÓN

A día de hoy la forma de obtener la energía es un tema complicado. Por un lado se está basando la mayoría del mix energético en combustibles fósiles, por tanto, limitados. Por otro lado, se tiene un problema climático creciente debido a la contaminación. A pesar de que las normativas actuales no son excesivamente estrictas en cuanto a emisiones, se ha de prevenir una reducción de las emisiones de gases efecto invernadero.

Este trabajo se inició con la motivación de optimizar el proceso de combustión del metano, reduciendo emisiones y si fuera posible el consumo del metano sin sacrificar demasiado rendimiento.

No se puede olvidar que el metano es uno de los principales compuestos del gas natural alcanzando concentraciones dentro del mismo de hasta un 97%. Por tanto la combustión del gas natural supone en sí mismo un 23,7% del mix energético mundial y a su vez es un derivado del petróleo el cual supone junto con sus derivados un 32,6% del mix energético. Se está hablando de una de las principales fuentes de energía la cual no es renovable.

Pero sin embargo, aún están lejos de agotarse todas sus reservas. En España se dispone de reservas de metano aún sin explotar, debido a que con los métodos actuales es muy costosa. Un ejemplo de otro posible método es el fracking que se ha intentado aplicar en Canarias abriendo un nuevo dilema medioambiental. Este método tiene muchos detractores, no sin razón, ya que podría contaminar seriamente el agua y existe certeza que de que aumenta la actividad sísmica [BBC, 2013].

Otra forma de obtener metano menos conocidas, es a partir de los Hidratos de metano o hielo de metano. Se trata de moléculas de gas metano que han quedado atrapadas en moléculas de agua congelada. Se encuentran en grandes cantidades en los lechos marinos (a partir de 500 metros de profundidad) y en el suelo de las regiones polares (a menor profundidad, normalmente a partir de los 150 metros). Los depósitos submarinos concentran la inmensa mayoría de las reservas conocidas: acumulan cerca del 98% [Expansión, 2015].

Es necesario por tanto optimizar nuestros procesos actuales si queremos mantener el medio ambiente. Se debe tomar como ejemplo un quemador de metano desarrollado por la Universidad de Sydney. Dicho quemador tiene potencial para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero de las minas de carbón subterráneas en casi un 90% [SCIENCEDAILY, 2010].

También a nivel global se puede trabajar por la optimización de los recursos. Según los estudios realizados por la petrolera BP, Europa redujo en el año 2013 el consumo de energías un 3,9%, mejorando la eficiencia. Por tanto no es una utopía reducir el consumo [BP, 2015].

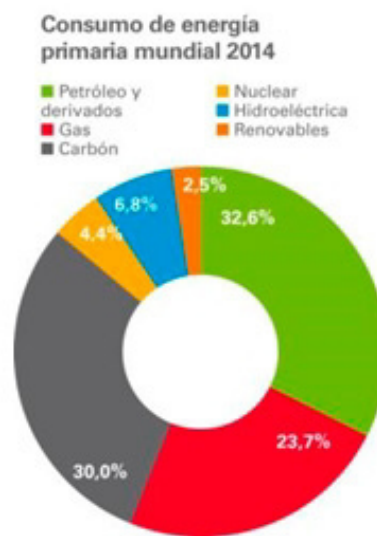


Figura 1. 1 Consumo de energía mundial en el 2014. Fuente: [www.bp.com, 2015]

1.3. OBJETIVOS

Los objetivos que se persiguen en este Trabajo Fin de Grado son:

- Determinar el mejor modelo numérico de un proceso de combustión turbulenta en un quemador de flujo rotante.
- Descripción del patrón de flujo del quemador simulado.
- Comprobación de los distintos dosados de la mezcla.
- Optimizar el modelo de combustión en la medida de lo posible reduciendo las emisiones.

Los contenidos de este Trabajo Fin de Grado se estructuran siguiendo el siguiente esquema:

- En el presente Capítulo 1 se incluyen la presentación del trabajo, su justificación y se exponen los objetivos a alcanzar.
- En el Capítulo 2 se establecen el modelo físico y numérico del quemador justificando la utilización de cada uno de ellos.
- En el Capítulo 3 se desarrolla el patrón de flujo y se describe en profundidad el caso estequiométrico.
- En el Capítulo 4 se busca la optimización de la mezcla comparando distintos dosados y comparando la influencia de dicho parámetro en las emisiones de CO₂, CO y NO_x.
- En el Capítulo 5 se establecen las conclusiones del trabajo, se proponen futuros trabajos, se señalan las referencias y se enumera la bibliografía.



[MODELO FÍSICO Y NUMÉRICO]

2.1. INTRODUCCIÓN

En el presente capítulo se expone el desarrollo teórico en el que se basa el cálculo computacional empleado y se describen los pasos seguidos para la realización de los ensayos. Se realizarán simulaciones del comportamiento del flujo en un proceso de mezcla de un combustible y un comburente en una cámara de combustión. El estado de ambos compuestos, tanto el del combustible, en este caso CH_4 , como el del comburente que es aire son gaseosos, incompresibles y estacionarios.

2.2. MODELO FÍSICO

2.2.1. GEOMETRÍA DEL QUEMADOR

Para el presente TFG se utiliza el tipo de quemador diseñador por Roback y Johnson [Roback, 1983] sin difusor. Se han realizado los suficientes ensayos sobre este tipo de quemador como para tener la suficiente información contrastada con la que poder comparar los resultados.

El modelo empleado se trata de un quemador de tipo axisimétrico formado por dos toberas coaxiadas en las que viajan el combustible y el comburente separados y una cámara de combustión del quemador.

El diseño del quemador se compone de:

1. Dos cilindros concéntricos por donde se añade el combustible y el comburente a la cámara de combustión, ambos de una longitud de 94mm. En el tubo interior de 25mm de diámetro viaja el combustible y en el tubo exterior con unos diámetros comprendidos entre 31mm y 59mm viaja el comburente.
2. La cámara de combustión consiste en un cilindro de 122mm de diámetro por 1016mm de longitud. En dicha cámara se produce la mezcla y la combustión de la misma.
3. En el cilindro más exterior, en el que viaja el comburente, existen 8 álabes fijos situados a 50mm aguas arriba de la descarga a la cámara de combustión. Este conjunto se le conoce como generador de Swirl e induce una componente acimutal en el comburente.

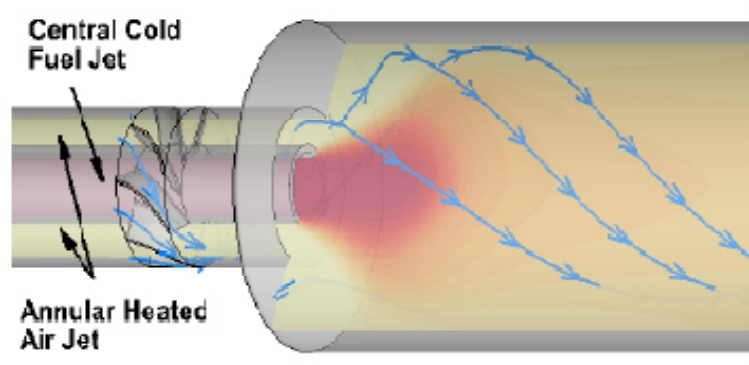


Figura 2. 1 Quemador de Roback y Johnson. Fuente: [Parra, 2015]

2.2.2. NÚMERO DE SWIRL

Antes se ha hablado del generador de Swirl, es importante conocer este parámetro. El número es adimensional y cuantifica el grado de rotación que hay en el flujo. Existen distintas formas de variar el número de Swirl: mediante álabes, mediante entradas axiales y tangenciales combinadas o mediante la entrada de un flujo tangencial directamente en la cámara de combustión.

En este caso se ha optado por la utilización de los álabes para obtener la componente tangencial que se necesita. Es importante conocer y caracterizar el número de Swirl ya que influye de manera directa en la eficiencia del mezclado y en las emisiones de contaminantes a la atmósfera [Zhou, 2002].

El parámetro se define físicamente como el cociente promediado entre el flujo axial de momento angular y el correspondiente de momento lineal multiplicado por el radio de la tobera.

$$S = \frac{\int \rho v_{\theta} v_z 2\pi r^2 dr}{\frac{d}{2} \int \rho v_z^2 2\pi r dr}$$

Se tiene constancia de que para valores altos de Swirl, por encima de un valor crítico, se empieza a producir recirculación en la zona central de la cámara de combustión debido a que el flujo se va abriendo a medida que entra en dicha cámara como consecuencia de su rotación llegando a aparecer flujo reverso [Roback, 1983]. Esto es debido a la distribución radial de la presión.

En el presente TFG los resultados obtenidos indican un valor para el número de Swirl de 0,87. Este se cataloga como un número de Swirl elevado.

2.2.3. CARACTERÍSTICAS DE LA MALLA

Las características de la malla se presentan en las tablas 2.1 y 2.2 y en la Figura 2.2

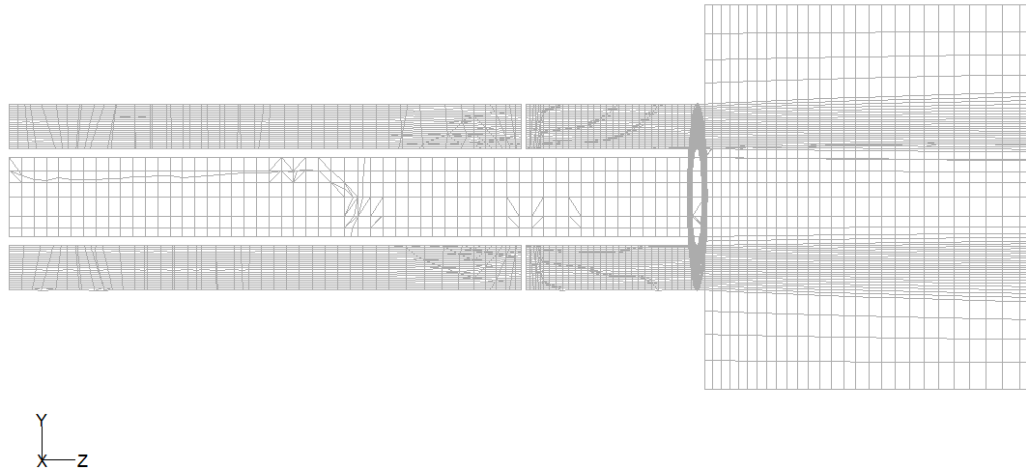


Figura 2. 1 Dominio físico discretizado

Tabla 2. 1 Particiones de la malla

4 Partitions (Particiones):	Cells (Celdas)	I-Cells (I-celdas)	Cell Ratio (Ratio de celda)	Faces (Caras)	I-Faces (I-Caras)	Face Ratio (Ratio de cara)	Neighbors (Vecinos)
0	47374	1387	0.029	144774	2148	0.015	2
1	47247	3243	0.069	144759	5015	0.035	3
2	45736	2869	0.063	141900	3969	0.028	3
3	44150	1126	0.026	136987	1162	0.008	2

Tabla 2. 2 Estadísticas colectivas de las particiones de la malla

Collective Partition Statistics (Colectivos de partición estadística):	Minimum	Maximum	Total
Cell count (Recuento de celdas)	44150	47374	184507
Mean cell count deviation (Recuento de la desviación de la célula principal)	-4.30%	2.70%	
Partition boundary cell count (Recuento de las particiones limites de la celda)	1126	3243	8625
Partition boundary cell count ratio (Ratio de recuento de las particiones límite de la celda)	2.60%	6.90%	4.70%
Face count (Recuento de caras)	136987	144774	562273
Mean face count deviation (Recuento de la desviación de la cara principal)	-3.60%	1.90%	

Partition boundary face count (Recuento de las particiones límite de la cara)	1162	5015	6147
Partition boundary face count ratio (Ratio de recuento de las particiones límite de la cara)	0.80%	3.50%	1.10%
Partition neighbor count (Recuento de las particiones vecinas)	2	3	
Partition Method (Método de partición)	Metis		
Stored Partition Count (Recuento de particiones acumuladas)	4		
Nodes (Nodos)			193316

Se puede observar en la tabla 2.2 que la malla está compuesta por cerca de 200000 celdas. Para la simulación se ha optado por una simulación en paralelo en un procesador de 4 núcleos. Para lo cual como se observa en la tabla 2.1 se divide el dominio en cuatro trozos equilibrados en número de celdas y caras entre los diferentes procesadores.

2.3. MODELO NUMÉRICO

2.3.1 INTRODUCCIÓN

Existe una rama de la Mecánica de Fluidos que se encarga del estudio del comportamiento de los fluidos mediante la simulación numérica, se trata de la Fluidodinámica Computacional o CFD (*Computational Fluid Dynamics*) [Miltner, 2015].

La CFD tiene en cuenta la transferencia de calor, las reacciones químicas y otros fenómenos físicos. También permite la resolución de las ecuaciones del flujo fluido en el dominio o región, siendo establecidas las condiciones de contorno por el usuario [Hirsch, 1994]. Además, permite sustituir el tiempo de trabajo humano por tiempo de máquina. Por tanto se reduce el tiempo y el dinero.

Para resolver el flujo de un fluido usando la CFD, se utilizan las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento, energía cinética turbulenta, disipación de la energía cinética turbulenta, energía y fracción másica de especies químicas formuladas en las ecuaciones de Navier-Stokes.

2.3.2 SOFTWARE Y HARDWARE

Para la simulación numérica se ha utilizado el software FLUENT 6.3.26 tanto en los ordenadores del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales como en ordenador personal.

El software resuelve mediante el método de volúmenes finitos las ecuaciones de conservación de Navier-Stokes para flujos estacionarios, incompresibles, turbulentos y reactivos.

El hardware de los ordenadores de la escuela son con procesador de 8 núcleos Intel i7 4720 y 16GB de memoria RAM. El ordenador personal utilizado es de un procesador de 4 núcleos Intel i5 M480 y 6GB de memoria RAM.

2.3.3. CONDICIONES DE CONTORNO

Las características del flujo y del fluido se establecen en este apartado mediante la definición de las condiciones de contorno y las características del combustible y el comburente.

En la Tabla 2.3 se establecen las condiciones de contorno de la mezcla estequiométrica. Además, las paredes se consideran adiabáticas al imponer flujo de calor nulo. En el próximo capítulo se tratará los casos de mezcla pobre o rica con distinta concentración de metano.

Las sustancias que componen la mezcla e intervienen en la combustión son metano, un aditivo inerte y los componentes del aire. El aditivo contiene las mismas características que el metano pero no interviene en la reacción. Con esto se asegura poder controlar la concentración de CH₄ que se aporta a la mezcla.

Tabla 2. 3 Condiciones de contorno de entrada

	Combustible	Comburente
Inyección	Tobera Central	Tobera Anular
Diámetro (mm)	0-25	31-59
Fracción másica	23,4%CH4 76,6%Add	22% O2 78% N2
Temperatura (°K)	3.0000E+02	1.2000E+03
Densidad (Kg/m³)	6.5267E-01	2.9452E-01
Velocidad (m/s)	6.6000E-01	1.5400E+00
Caudal (m³/s)	3.2398E-04	3.0480E-03
Gasto (Kg/s)	2.1145E-04	8.9767E-04
Intensidad Turbulenta (%)	1.2000E+01	7.5000E+00
Conductividad Térmica (W/m/K)	Mixing-law	
Viscosity (kg/m/s)	Mixing-law	
Molecular Weight (kg/kmol)	1.6000E+01	2.8880E+01

Las condiciones de velocidad e intensidad turbulenta así como las dimensiones del dispositivo se corresponden con las de Roback y Johnson [Roback, 1983].

2.3.4. MODELADO DE TURBULENCIA

El mayor obstáculo de la Mecánica de Fluidos actual es poder modelar la turbulencia. La turbulencia se caracteriza por su aleatoriedad, por ser tridimensional y por ser desordenada. Por ello es difícil modelar el movimiento de un flujo turbulento mediante ecuaciones. Pero la turbulencia está presente en multitud de aplicaciones de la ingeniería y es necesario tenerla en cuenta a la hora de diseñar y hacer los cálculos necesarios [Pope, 2000].

El método de resolución consiste en discretizar el flujo continuo en una serie de celdas o elementos en los que se resuelve las ecuaciones necesarias obteniéndose valores discretos en los nodos.

Posteriormente, se aplica un número finito de ecuaciones algebraicas con variables independientes discretas. Este sistema de ecuaciones se resuelve mediante iteración buscando la convergencia hacia unos valores discretos de las variables en los nodos.

Existen varios modelos de turbulencia y la elección del modelo depende del nivel de precisión necesario, de los recursos computacionales disponibles y de la cantidad de tiempo disponible para la simulación entre otros. Se tienen tres opciones principalmente DNS, LES y RANS.

2.3.4.1 RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)

Para el presente TFG se ha utilizado el modelo de turbulencia llamado RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*). Este modelo llamado ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo de Reynolds consiste en descomponer el campo de velocidades y promediar en el tiempo el movimiento y las fluctuaciones turbulentas. Con esto se reduce en gran medida el gasto computacional al no tener que resolver las escalas turbulentas. Sin embargo, el modelado de la turbulencia añade el problema del cierre, es decir, el número de incógnitas es superior al de ecuaciones. Cada modelo de turbulencia basado en RANS lo resuelve añadiendo distintas ecuaciones de conservación.

El modelo de turbulencia RANS ofrece distintas posibilidades que se pueden clasificar en función del número de ecuaciones adicionales. En la Tabla 2.4 se incluyen además del número de ecuaciones las características de cada modelo.

Tabla 2.4 Modelos de turbulencia [Fluent, 2009]

Nombre	Nº de ecuaciones adicionales	Características
<i>Modelo Spalart-Allmaras</i>	Modelo de una ecuación	Diseñado especialmente para aplicaciones aerospaciales, que impliquen flujos con altas velocidades en los contornos de pared
<i>Modelo K-ε Standard</i>	Modelo simple de dos ecuaciones	Robusto y conveniente para iteraciones iniciales
<i>Modelo K-ε RNG</i>	- Variante del modelo <i>K-ε Standard</i> - Tiene un término adicional en la ecuación ϵ .	Preciso para flujos rápidamente deformados y turbulentos
<i>Modelo K-ε Realizable</i>	- Variante del modelo <i>K-ε Standard</i> - Nueva formulación para la viscosidad turbulenta - Nueva ecuación de transporte para ϵ .	Preciso para predecir chorros planos y cilíndricos. Recomendado para flujos con capa límite bajo fuertes incrementos de presión adversos, flujos con separación y recirculación
<i>Modelo K-ω Standard</i>	Resuelve para <i>K-ω</i> ω = valor de disipación específica (ϵ/K)	Recomendado para flujos con bajo nº de Reynolds, contornos de pared, capa límite y flujos no estacionarios.
<i>Modelo K-ω SST</i>	- Modelo variante de <i>K-ω Standard</i> - En la región cerca de la pared se comporta como <i>K-ω</i> - En la corriente libre se comporta como <i>K-ε</i>	Más exacto y fiable para un mayor número de tipos de flujo, como incrementos de presión adversos en perfiles aerodinámicos, ondas de choque transitorio, etc.
<i>Modelo Reynolds Stress</i>	- Modelo de cinco ecuaciones - Evita la formulación isotrópica de la viscosidad turbulenta	Conveniente para flujos tridimensionales complejos con una elevada turbulencia y rotación. Requiere de mucho tiempo de cálculo y capacidad de memoria.

El modelo que mejor se adapta al propósito del TFG es el K-ε RNG [Pérez, 2013]. También ensayaron este modelo otros autores [Komarek, 2010]. Dentro de este modelo se vuelve a tener dos opciones: Differential Viscosity Model y Swirl Dominated Flow. Se selecciona el segundo el de Flujo Dominado por el Swirl. El modelo K-ε RNG es similar al modelo K-ε Standard, pero incluye más opciones:

- El modelo RNG tiene un término adicional en la ecuación ϵ mejorando notablemente la exactitud del flujo.
- El modelo RNG incluye el efecto del torbellino en la turbulencia, lo cual mejora la precisión para los flujos rotantes.
- El modelo RNG añade una fórmula analítica para obtener el número de Prandtl, en cambio el modelo K-ε Standard utiliza constantes.
- El modelo K-ε Standard se utiliza para Reynolds altos, sin embargo el RNG incluye una fórmula diferencial derivada analíticamente para la viscosidad efectiva que tiene en cuenta los efectos para Reynolds bajos. En contrapartida es dependiente de un tratamiento adecuado de la zona de la pared [Fluent, 2009]. En este caso la parte que más importa estudiar es lejos de la pared.

2.3.5. MODELADO DE LA COMBUSTIÓN

El proceso combustión consiste en un conjunto de reacciones químicas exotérmicas que añaden nuevas ecuaciones de conservación a resolver. En este TFG se presenta un caso de combustión no premezclada en el cual el combustible y el comburente entran a la cámara de combustión separados en dos flujos, lo cual complica la resolución con respecto a un caso premezclado. Los quemadores de flujos no premezclados evitan el peligro de un retroceso de la llama hacia los tanques de almacenamiento del combustible.

La base del caso no premezclado es que bajo un determinado conjunto de hipótesis de simplificación, el estado termoquímico instantáneo del fluido está relacionado con la fracción de mezcla, f .

La fracción de mezcla (*mixture fraction*) se puede escribir en términos de fracción másica como:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}}$$

donde Z_i es la fracción de masa para el elemento, i . El subíndice ox se refiere al valor de la entrada de corriente del oxidante o comburente y el subíndice $fuel$ al combustible. Si los coeficientes de difusión para todas las especies son iguales entonces la ecuación pasa a ser única.

La hipótesis de coeficientes de difusión iguales para todas las especies no es válida en flujo laminar, pero sí en flujo turbulento, como es el caso de este TFG, debido a que la convección turbulenta predomina sobre el transporte sobre la difusión molecular [Fluent, 2009].

Las velocidades de reacción para flujos turbulentos pueden ser representadas por modelos: PDF, el ED y el EDC.

2.3.5.1 PDF (Probability *Density Function*)

Para el proceso de combustión presente en este TFG el modelo más adecuado es el de *Función Densidad de Probabilidad* (PDF) [Frassoldati, 2005]. La ventaja de este modelo reside en predecir la formación de especies intermedias sin necesitar conocer los datos detallados de la cinética química.

Este modelo representa únicamente las especies químicas más importantes que intervienen en la reacción [Fluent, 2009]. Además se tiene la experiencia de otros muchos ensayos que se han realizado para determinarlo como la mejor opción [Escorial, 2015].

El modelado de llamas no premezcladas requiere la resolución de las ecuaciones de transporte de la fracción de mezcla y obtiene la concentración de las especies a partir del campo de fracción de mezcla predicho. De esta manera, se evita tener que resolver las ecuaciones de transporte para cada una de las especies que intervienen en la reacción.

Existen numerosas formas y modelos estadísticos para la función PDF, siendo las más destacadas la función de onda rectangular, la función doble delta, la distribución Gaussiana y la función estadística β . Esta última es la más común y la que se utilizará para resolver los modelos computacionales.

Bajo la hipótesis de equilibrio químico, las propiedades termodinámicas escalares de densidad, temperatura y fracción másica están determinadas por la fracción de mezcla. En este aspecto es en el que reside el potencial del modelado mediante la fracción de mezcla.

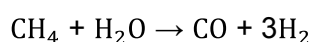
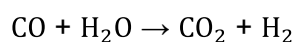
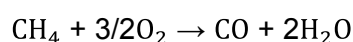
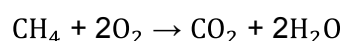
Sin embargo, no interesan las propiedades termodinámicas escalares instantáneas, sino que interesan los valores promedios de estas propiedades termodinámicas del fluido. La relación entre los valores instantáneos y sus promedios viene determinada por la interacción entre los fenómenos turbulentos y químicos. El uso de una función de densidad de probabilidad permite relacionar estos dos fenómenos y obtener los valores promediados de las propiedades termodinámicas escalares en cada punto del campo fluido.

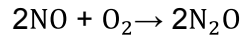
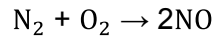
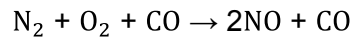
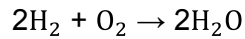
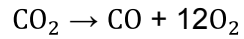
Para finalizar, se puede concluir que el modelo de combustión mediante PDF añade dos nuevas ecuaciones de conservación para el promedio de la fracción másica y su varianza. La interacción entre la turbulencia y las reacciones químicas se resuelve suponiendo una función probabilidad de densidad que depende de estas dos variables escalares.

Los valores de las propiedades termodinámicas escalares de cada punto del fluido se miden o calculan y tabulan previamente a la simulación numérica y se recuperan durante la simulación.

2.3.6. MODELADO DE LAS EMISIONES CONTAMINANTES

Como resultado de la combustión del CH_4 y el aire se obtienen como productos el CO , CO_2 , H_2O , H_2 y CH_4 sin quemar. A continuación se muestran algunas de las reacciones que se dan dentro de la cámara de combustión.





Como especies contaminantes se entra a valorar la concentración de CO, CO₂, CH₄ sin quemar, NO y N₂O.

La fracción másica de CO, CO₂ y CH₄ se extraen a partir de la resolución del modelo de combustión PDF. Tras la simulación se extraen los datos para su tratamiento posterior.

Para conseguir las emisiones de NO_x resultantes de la combustión se ha realizado un post-proceso de los datos obtenidos. Una vez la simulación ha convergido para las ecuaciones del fluido, de la turbulencia, de la energía y del PDF no es necesario incluirlas para obtener las emisiones de NO_x.

Fluent permite elegir que ecuaciones quieres resolver a la hora de lanzar la simulación por lo que no se necesita volverlas a incluir. Los datos ya obtenidos se conservan y los de la nueva simulación se añaden a los anteriores.

Dentro de las especies se pueden obtener los NO_x debidos a la formación térmica, reacción inmediata y a la combustión del fuel. Los resultados de la simulación se obtienen de forma inmediata al no tener que repetir la iteración para todas las ecuaciones.



[LLAMA ESTEQUIOMÉTRICA]

3.1. INTRODUCCIÓN

En el presente capítulo se realizará un análisis de la mezcla estequiométrica del CH_4 y el aire. Se considera mezcla estequiométrica para una concentración de CH_4 del 23.4% en el conducto interior por tanto el resto lo ocupará el aditivo inerte en una concentración del 76.6%. Esta mezcla tiene una velocidad fija de 0.66m/s Por el conducto externo viaja el flujo de aire a una velocidad fija de 1.54m/s por tanto la cantidad de aire no varía (22% O_2 y 78% N_2). En el próximo capítulo se variará la concentración de CH_4 para alcanzar mezclas pobres y ricas.

Interesa el análisis de la temperatura, la velocidad en dirección Z (Axial) e Y (Radial), las concentraciones de CH_4 , CO, CO_2 y de NOx para las distintas posiciones dentro de la cámara de combustión. Se ha realizado una subdivisión del quemador en 10 posiciones ($z=-0.005\text{m}$, $z=0.005\text{m}$, $z=0.025\text{m}$, $z=0.05\text{m}$, $z=0.1\text{m}$, $z=0.15\text{m}$, $z=0.2\text{m}$, $z=0.25\text{m}$, $z=0.3\text{m}$, $z=0.4\text{m}$) donde se tomarán las medidas de cada variable.

A partir de este capítulo se relacionará la concentración de CH_4 con un parámetro llamado Ratio de Equivalencia Combustible-Aire o Dosado Relativo del Combustible (Φ). El cual se define como:

$$\Phi = \frac{\left(\frac{G_{comb}}{G_{oxig}}\right)_{llama}}{\left(\frac{G_{comb}}{G_{oxig}}\right)_{esteq}}$$

donde G_{comb} se refiere al gasto de combustible y G_{oxig} se refiere al gasto de oxígeno. En el caso estequiométrico el numerador coincide con el denominador y el parámetro phi toma como valor la unidad ($\Phi=1$).

3.2. ANÁLISIS DE LA TEMPERATURA

En la Figura 3.1 se observa la distribución de los contornos de temperaturas en los primeros 280mm (dos veces el diámetro exterior de la cámara de combustión o 2D). Se aprecia en una zona comprendida entre 0.25D y 0.75D un elevado gradiente de temperatura pasando en poco espacio de 300K a cerca de 1700K. En esta zona se sitúa la llama. La temperatura máxima alcanzada en la cámara de combustión es de 2310K.

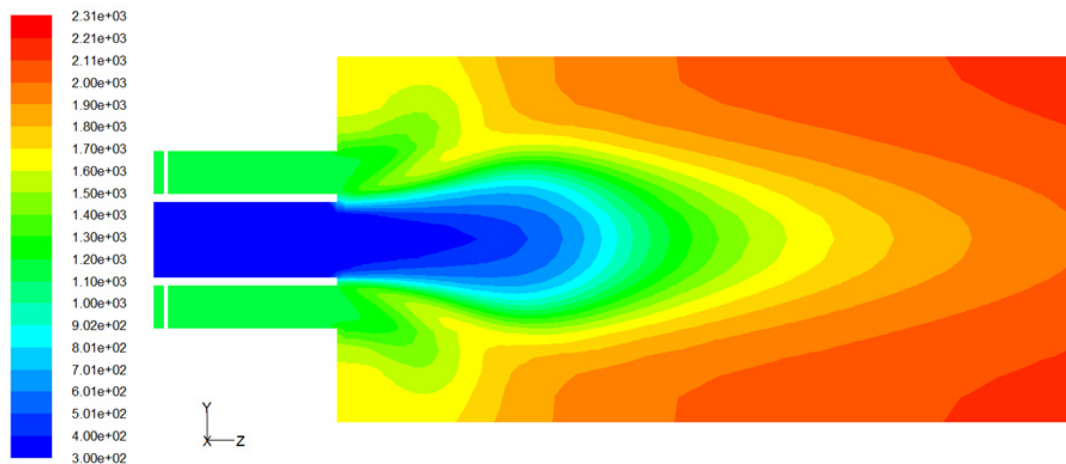


Figura 3. 1 Contorno de temperaturas

Se han pretendido agrupar los perfiles en tres zonas distintas: zona inicial, zona intermedia y zona final. De esta manera, se aprecian las variaciones a lo largo de todo el diámetro de la cámara para las distintas divisiones. De otra manera, las zonas de entrada y final, estarían demasiado agrupadas como para distinguir variaciones en las distintas divisiones. Por tanto agrupamos en la zona inicial (gráfica a): $z=-0.005m$ $z=0.005m$ $z=0.025m$), zona intermedia (gráfica b): $z=0.05m$ $z=0.1m$ $z=0.15m$) y zona final (gráfica c): $z=0.2m$ $z=0.3m$ $z=0.4m$). Estas agrupaciones se aplican en los demás perfiles del capítulo.

En la Figura 3.2 se muestra la evolución de las temperaturas a lo largo de la cámara de combustión. Se puede apreciar en la gráfica a como línea de cuadrados toma un valor de 1200K en los extremos (tubería por la cual viaja el aire) y un valor de 300K en la zona central (tubería por la que viaja la mezcla estequiométrica de combustible). Una vez que el combustible se mezcla y se inicia la llama (zona de llama aproximada para $z=0.025m$) aumenta la temperatura de manera progresiva en la cámara de combustión. Esta se va homogeneizando a lo largo del diámetro de la cámara (gráfica b) hasta prácticamente ser una línea horizontal para la posición de $z=0.4m$ (línea de círculos de la gráfica c).

En anteriores trabajos se ha modificado la temperatura del combustible para comprobar su influencia en la combustión [Escorial, 2015]. Se concluyó que la temperatura afectaba al gradiente de temperaturas y a los productos de la combustión. De manera que el aumento de la temperatura del combustible aumentaba los productos de la combustión pero mejoraba el gradiente reduciendo así la temperatura en las paredes de la cámara.

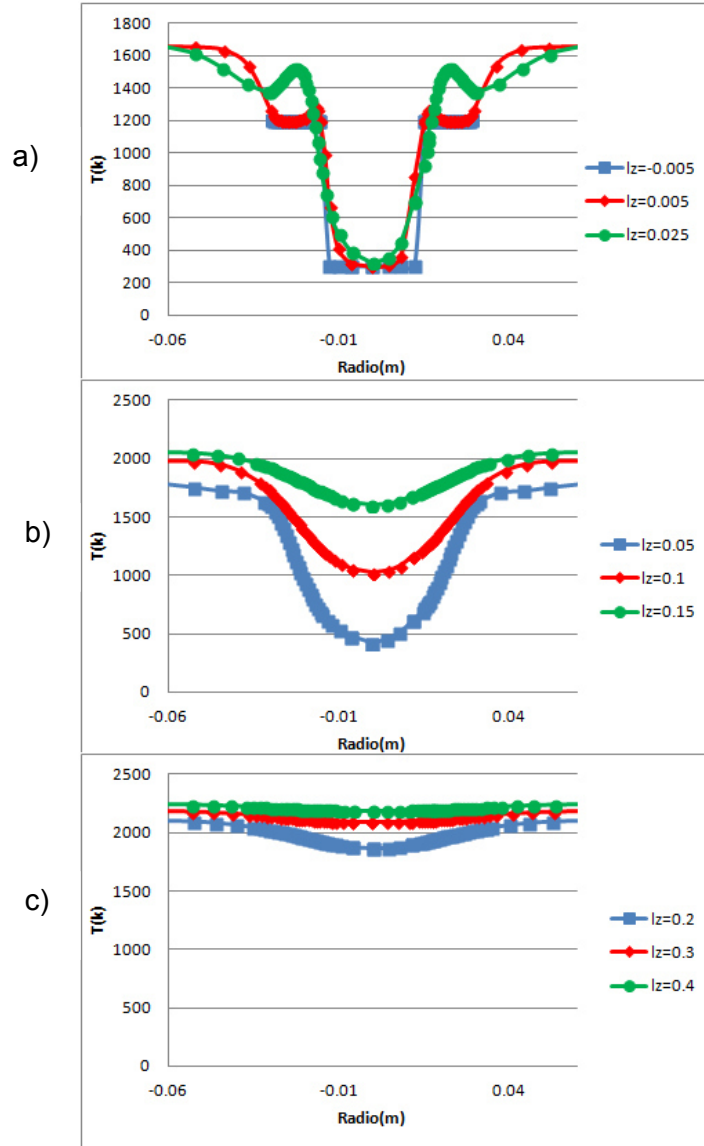


Figura 3. 2 Perfiles de Temperatura (Gráfica a): $z = -0.005m$ $z = 0.005m$ $z = 0.025m$, Gráfica b): $z = 0.05m$ $z = 0.1m$ $z = 0.15m$ Gráfica c): $z = 0.2m$ $z = 0.3m$ $z = 0.4m$)

3.3. ANÁLISIS DE LA VELOCIDAD

En este apartado se analizan las velocidades axial y tangencial a lo largo de la cámara de combustión. Tanto el combustible como el comburente se introducen en la cámara de combustión con una componente axial que viene dada por su velocidad en la dirección Z. En el caso del combustible entra en la cámara de combustión con una velocidad axial de 0.66m/s. Para el caso del comburente la velocidad axial es de 1.54m/s.

3.3.1. VELOCIDAD AXIAL

En la Figura 3.3 se puede comprobar que efectivamente las velocidades del combustible y comburente son de 0.66m/s y 1.54m/s respectivamente. Además, se puede comprobar cómo la velocidad de ambos flujos en las proximidades de la pared es menor que en el resto del fluido. Esto se debe a que tanto el combustible como el comburente son fluidos viscosos y se adhieren a la superficie de los tubos. Este fenómeno se explica por la teoría de la capa límite [Crespo, 2006].

En la tubería exterior, por la cual viaja el comburente, se puede apreciar como en la zona donde se sitúa el generador de Swirl ($z=-0.05\text{m}$) aumenta la velocidad axial del comburente. Esto se debe a que los álabes disminuyen la sección de paso de la tubería aumentando la velocidad del fluido por el efecto Venturi [White, 2008].

La expansión brusca en la cámara de combustión da lugar a una zona de recirculación en la zona central (eje de la cámara) y una zona de recirculación periférica (paredes de la cámara). Es importante la posición de estas zonas de recirculación y también lo es su tamaño, este último depende de forma directa del número de Swirl y de la geometría del difusor [Mendoza, 2013].

La primera sería en las esquinas de la cámara de combustión de un azul marino en las cuáles se produce lo que se llama una Zona de Recirculación Exterior (ZRE). En la cual el fluido toma valores negativos de velocidad axial, lo cual es indicativo de flujo reverso. Si se observa la línea de rombos en la gráfica a de la Figura 3.4 ésta se sitúa por debajo de 0.

La segunda sería la zona de color azul claro en el centro de la cámara de combustión en la cual el flujo se ralentiza pero no llega a tomar valores negativos de la velocidad axial. Si se observa la Figura 3.4 en ningún punto central de las gráficas se alcanzan valores negativos. No se produce por tanto Zona de Recirculación Interior (ZRI).

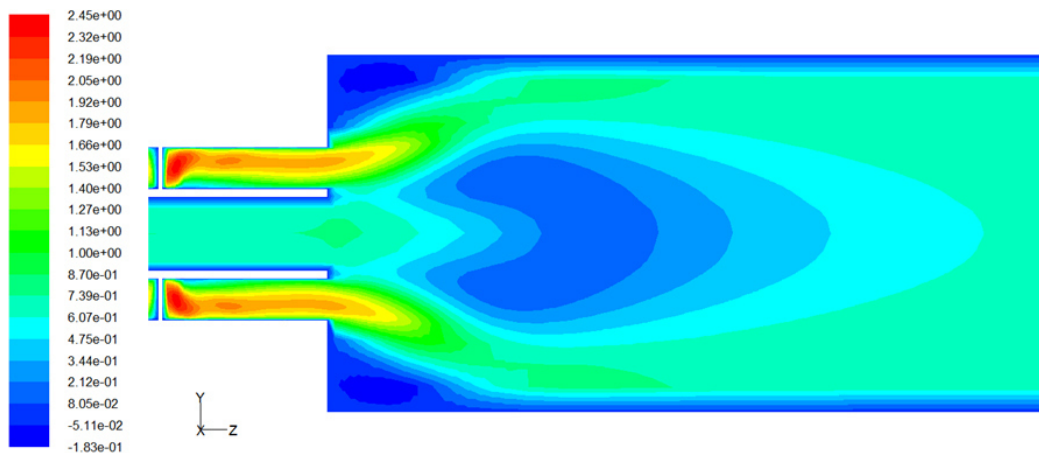


Figura 3. 3 Contornos de la velocidad axial

Llama estequiométrica

La disminución de la velocidad en la zona central refleja la existencia de una zona de divergencia, el fluido se desplaza en diagonal. El incremento final de velocidad (línea de círculos de la gráfica c) se debe a los productos de la reacción, con menor densidad y mayor velocidad, de manera que siempre se cumpla el gasto másico.

Entre las zonas anteriores se produce la mezcla del combustible y el comburente. Una vez que se mezclan y se produce la combustión, la velocidad se iguala, alcanzando una velocidad prácticamente uniforme en el final de la cámara de combustión (línea con rombos en la gráfica c de la Figura 3.4).

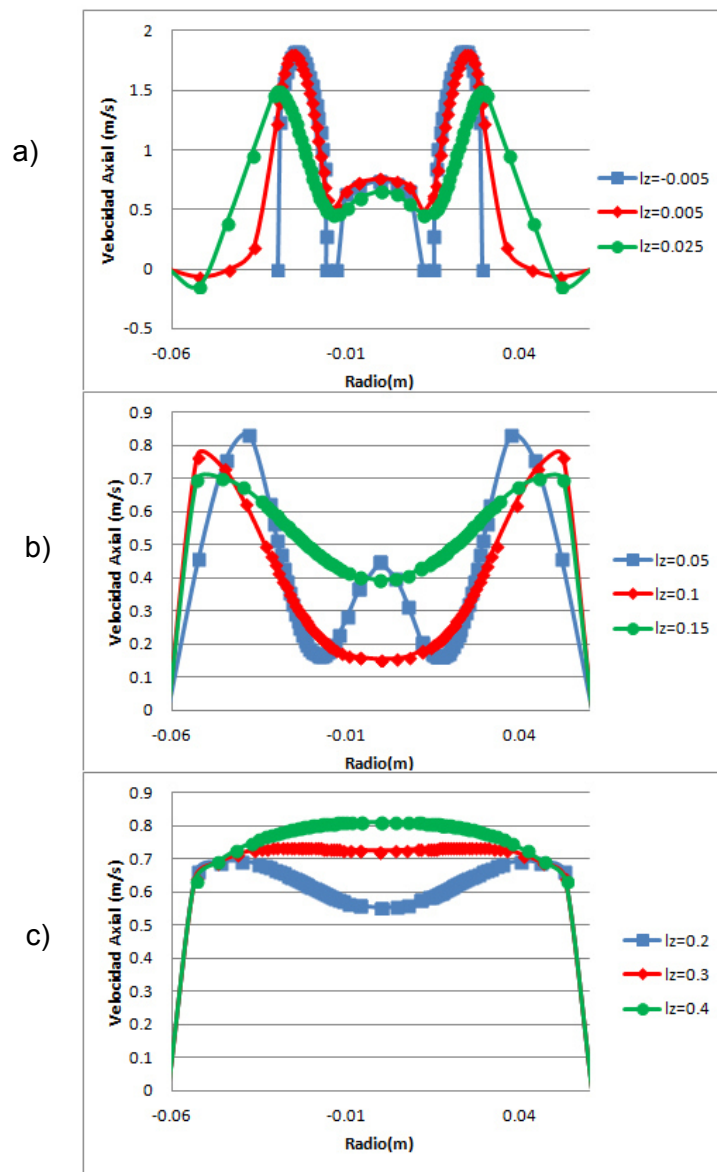


Figura 3. 4 Perfiles de Velocidad Axial (Gráfica a): $z=-0.005\text{m}$ $z=0.005\text{m}$ $z=0.025\text{m}$, Gráfica b): $z=0.05\text{m}$ $z=0.1\text{m}$ $z=0.15\text{m}$ Gráfica c): $z=0.2\text{m}$ $z=0.3\text{m}$ $z=0.4\text{m}$)

3.3.2. VELOCIDAD TANGENCIAL

Se puede observar en las gráficas de la Figura 3.5 (la línea de cuadrados de la gráfica a) que el combustible no tiene velocidad tangencial a la entrada de la cámara de combustión. En cambio una vez que entran ambos fluidos en la cámara se mezclan aumentando la zona del fluido donde existe componente tangencial.

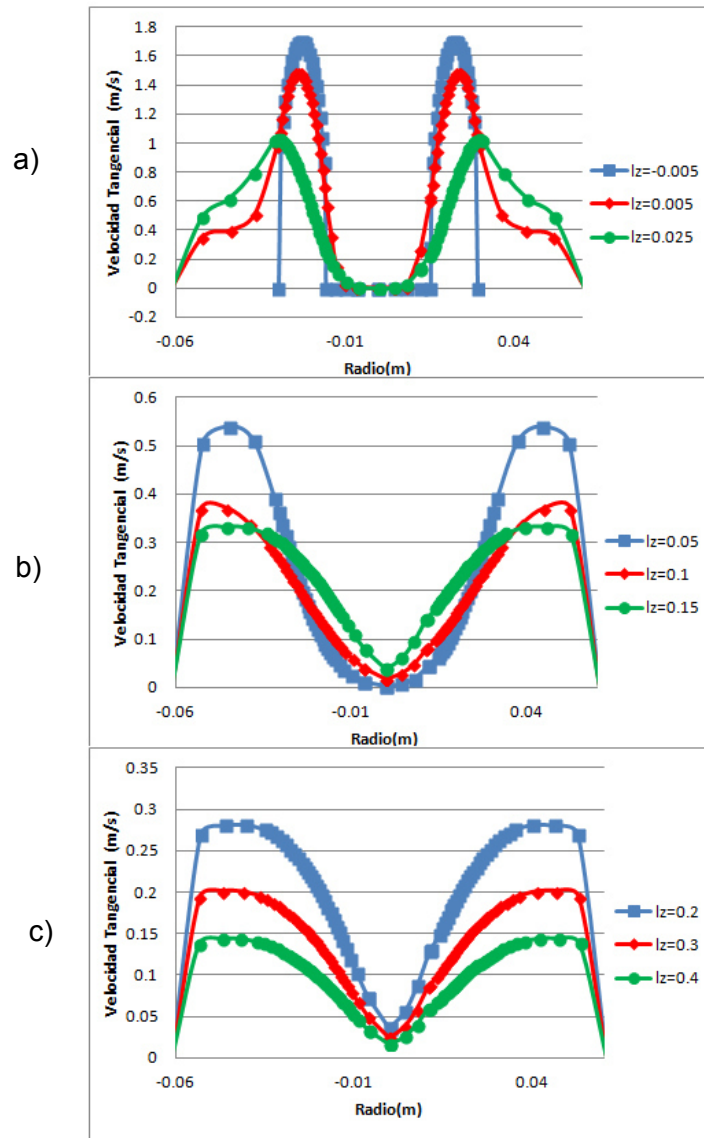


Figura 3. 5 Perfiles de Velocidad Tangencial (Gráfica a): $z = -0.005\text{m}$ $z = 0.005\text{m}$ $z = 0.025\text{m}$, Gráfica b): $z = 0.05\text{m}$ $z = 0.1\text{m}$ $z = 0.15\text{m}$ Gráfica c): $z = 0.2\text{m}$ $z = 0.3\text{m}$ $z = 0.4\text{m}$)

En la Figura 3.6 se puede observar que es a partir del generador de Swirl donde aparece una componente tangencial en el aire que entra en la cámara de combustión. Sin embargo el combustible no atraviesa los álabes del generador de Swirl y por eso su componente tangencial es cero. Se omiten los contornos de velocidad tangencial ya que se observa mejor su evolución en los perfiles.

3.4 ANÁLISIS DE EMISIONES E INQUEMADOS

Si se observa la Figura 3.7 se puede comprobar cómo una vez que el CH_4 entra en la cámara de combustión y entra en contacto con el aire comienza a disminuir su cantidad en fracción másica. Primeramente se produce la mezcla del aire y el CH_4 disminuyendo su fracción másica con respecto al interior del tubo del combustible. Pero posteriormente se inicia la combustión de la mezcla consumiendo el CH_4 prácticamente por completo.

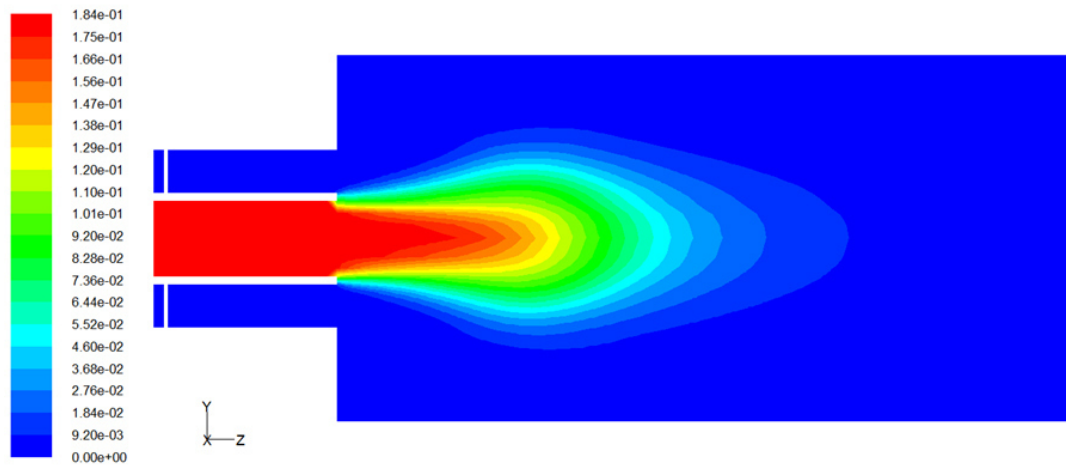


Figura 3. 6 Contornos de la Fracción másica de CH_4

En las gráficas del Figura 3.8 se comprueba cómo pasa la fracción másica del CH_4 de 0.184 (línea de cuadrados de la gráfica a) a un valor de 0.0092 (línea rombos de la gráfica c) lo que equivale a 9200ppm o lo que es lo mismo 6532mg/Nm³.

Si hacemos un cálculo de las emisiones de CH_4 . El caudal de la tobera es la suma de los caudales del comburente y el combustible es decir $3.374 \times 10^{-3} \text{m}^3/\text{s}$ lo que equivale a 12.15Nm³/h.

Bajo el supuesto de un quemador funcionando 24horas al día 365 días al año. Los Kg/año de CH_4 por inquemados serían 695.23Kg/año. Umbral establecido actualmente en 100000Kg/año para toda España [BOE, 2015].

Teniendo se en cuenta que este umbral es para todo el conjunto de España. Se carece de referencias en este aspecto como para saber si este quemador emite mucho o poco CH_4 a la atmósfera.

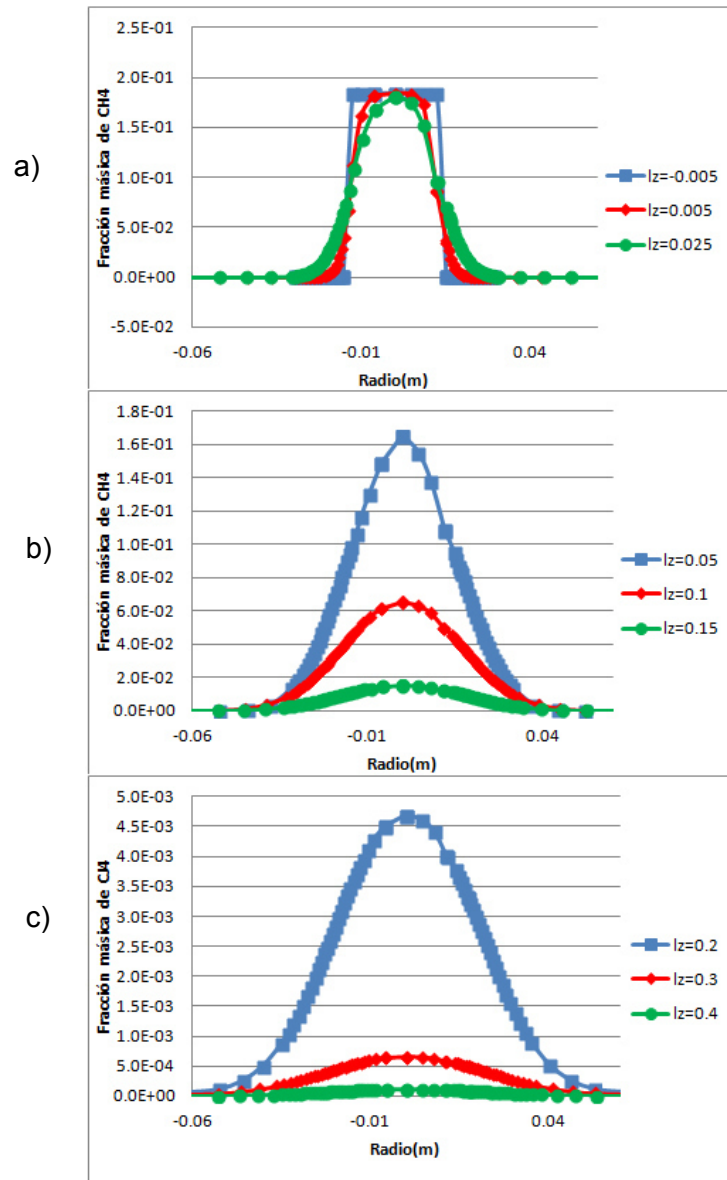


Figura 3. 7 Perfiles de Fracción másica de CH₄ (Gráfica a): $z = -0.005$ m $z = 0.005$ m $z = 0.025$ m, Gráfica b): $z = 0.05$ m $z = 0.1$ m $z = 0.15$ m Gráfica c): $z = 0.2$ m $z = 0.3$ m $z = 0.4$ m)

3.4.1. EMISIONES DE CO₂

El CO₂ se trata de una especie final, que se genera cuando el CO se consume. Por este motivo se centrará el análisis a partir de la zona de llama. Es a partir de esta zona, en la cual se genera el CO, donde se podrán apreciar fluctuaciones en la fracción másica de CO₂.

Se observa en la Figura 3.9 que inicialmente el contenido en CO₂ es prácticamente nulo y es a partir del final de la zona de la llama que empieza a aparecer esta especie. Se puede comprobar cómo para la zona de la cámara de combustión a partir de 0.75D existe un elevado gradiente de fracción másica.

Si se observa la Figura 3.10 se comprueba cómo a partir de la posición z=0.15m va aumentando paulatinamente a lo largo de la cámara de combustión.

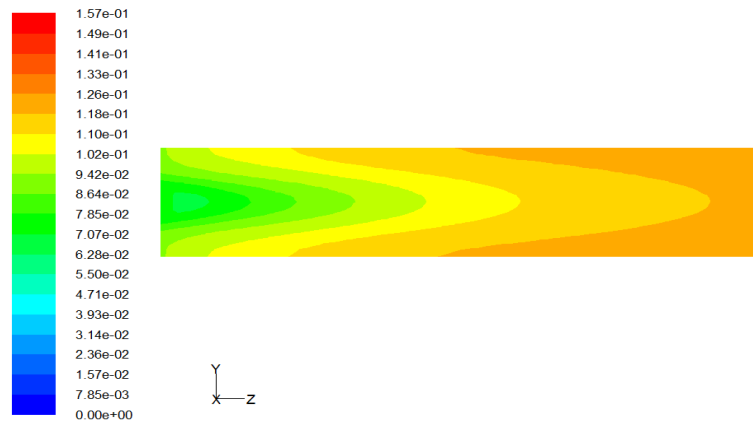


Figura 3.8 Contornos de la Fracción másica de CO₂

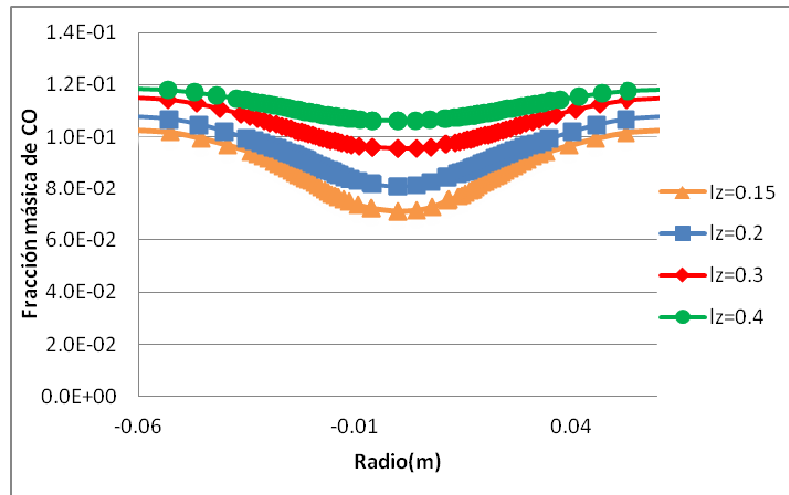


Figura 3.9 Perfiles de Fracción másica de CO₂ (z=0.15m z=0.2m z=0.3m z=0.4m)

3.4.2. EMISIONES DE CO

Como se puede observar en la Figura 3.11 la concentración de CO aumenta en la zona de llama. Es uno de los productos de la combustión. En la Figura 3.12 para la posición $z=-0.005\text{m}$, que se encuentra dentro de las tuberías, el valor de CO es nulo. Es a partir de la posición $z=0.005\text{m}$ donde empieza a aumentar el CO en la zona correspondiente al inicio de la llama.

En la gráfica b vemos que la concentración alcanza un máximo en la zona central (línea de rombos) para luego ir disminuyendo en la gráfica c. Esto es debido a que el CO es una especie intermedia. Como se comentó en el apartado el CO se forma como producto de la combustión pero a medida que avanza en la cámara va desapareciendo para formar CO_2 .

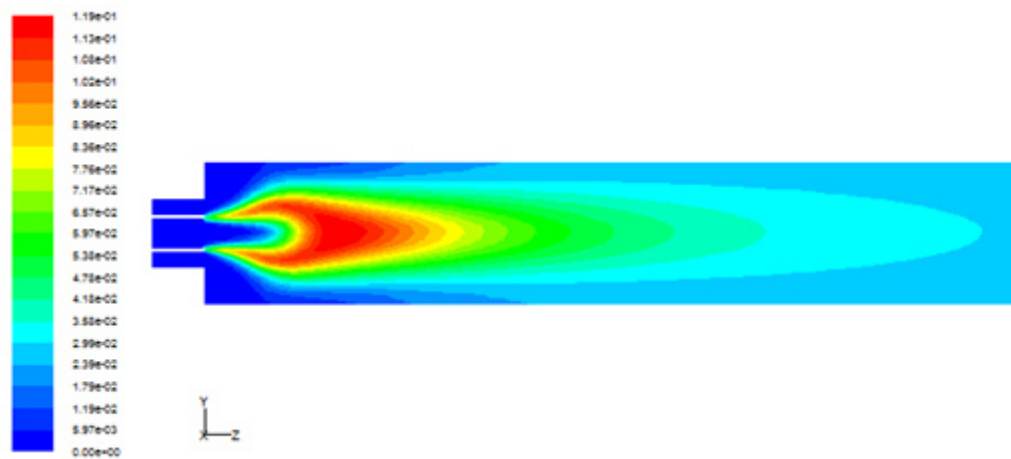


Figura 3.10 Contornos de la Fracción másica de CO

A pesar de ser una especie intermedia se producen emisiones de la misma a la salida de la cámara de combustión por una combustión incompleta. No se trata de un gas efecto invernadero, como el CH_4 y el CO_2 , pero es una especie extremadamente peligrosa para la salud. Es importante controlar por tanto las emisiones de todos ellos.

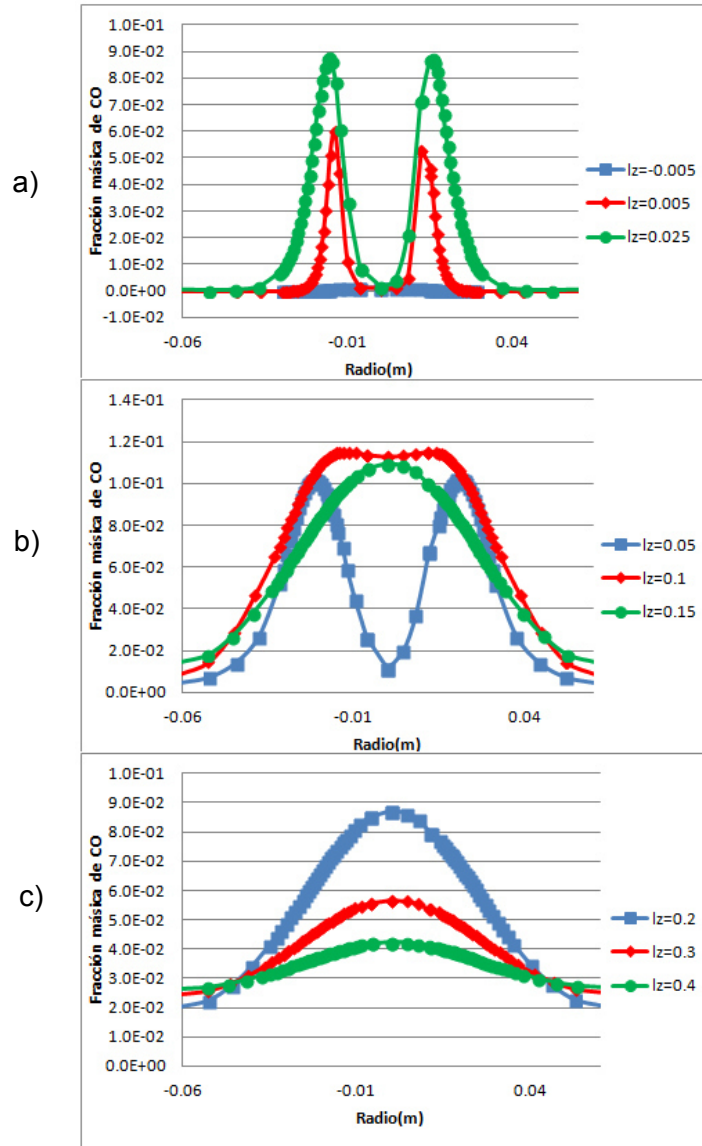


Figura 3. 11 Perfiles de Fracción másica de CO (Gráfica a): $z = -0.005$ m $z = 0.005$ m $z = 0.025$ m, Gráfica b): $z = 0.05$ m $z = 0.1$ m $z = 0.15$ m Gráfica c): $z = 0.2$ m $z = 0.3$ m $z = 0.4$ m)

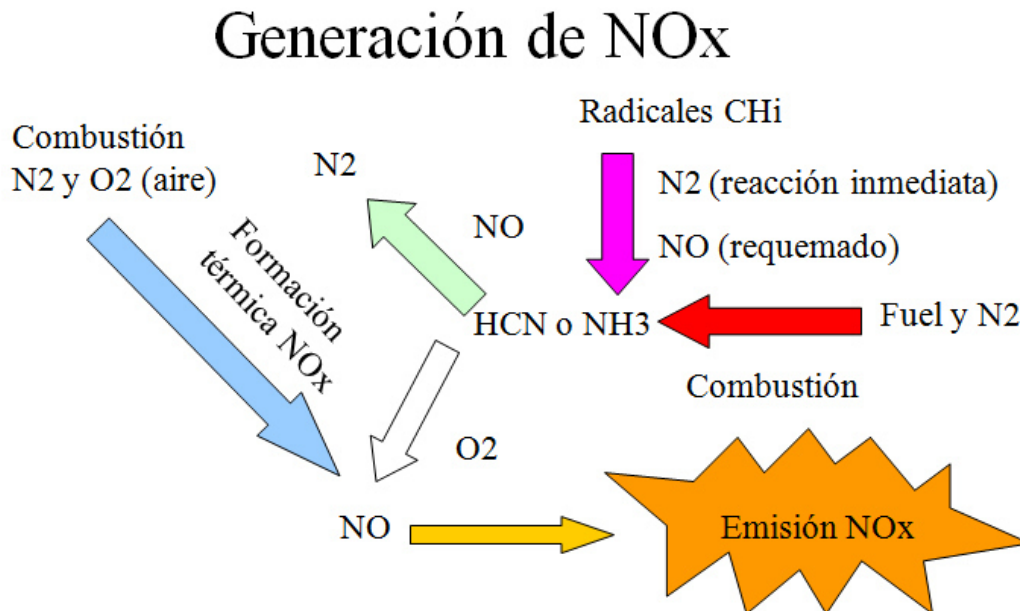
3.4.3 EMISIONES DE NOX

En este apartado se incluyen como emisiones de NOx, emisiones de NO, N₂O, HCN y NH₃. En el caso del ácido cianhídrico (HCN) y el amoníaco (NH₃) las emisiones son cero. Los NOx se componen principalmente de óxido nítrico (NO) y en menor medida de óxido nitroso (N₂O). Los NOx son un contaminante muy regulado por contribuir a:

- La lluvia ácida
- Destrucción de la capa de ozono
- Humos contaminantes

Los mecanismos de formación de los NOx son tres principalmente. En la Figura 3.13 se muestra un esquema de los tres mecanismos.

- Formación térmica
- Reacción inmediata
- Combustión de fuel



La tasa de formación de NOx se duplica cada
 $\Delta T = 90 \text{ K}$ para $T \leq 2200 \text{ K}$

Figura 3. 12 Mecanismos de formación de NOx [Fluent, 2009]

3.4.3.1. EMISIONES DE NO

En la Figura 3.14 se observa que para la posición $z=-0.005\text{m}$ la cantidad de NO es cero. Cuando se entra en la cámara de combustión ya en la posición $z=0.005\text{m}$ crecen los niveles de NO debido a la reacción inmediata por la presencia de radicales de CH_4 . El comburente trae una componente tangencial, que a la entrada de la cámara, arrastra el CH_4 hacia las paredes de la cámara de combustión. En esta zona la temperatura es superior a la del metano inicialmente. Iniciándose también el proceso de formación de NO térmico.

Una vez se alcanza la zona de llama la temperatura aumenta considerablemente. La mayor temperatura se da en las paredes de la cámara. Es en esta zona donde mayor importancia tiene el NO térmico. Esto se observa en la evolución de los perfiles de las gráfica b y c.

Llama estequiométrica

Una vez que la temperatura en la cámara se homogeniza a lo ancho de la cámara de combustión (esto ocurre en las posiciones $z=0.2\text{m}$, $z=0.3\text{m}$, $z=0.4\text{m}$) también se forma NO térmico en la zona central.

No se aprecia un aumento significativo del NO en la zona de la llama. Se considera por tanto que la formación de NO a partir de la combustión del fuel es mucho menor que para los otros dos mecanismos.

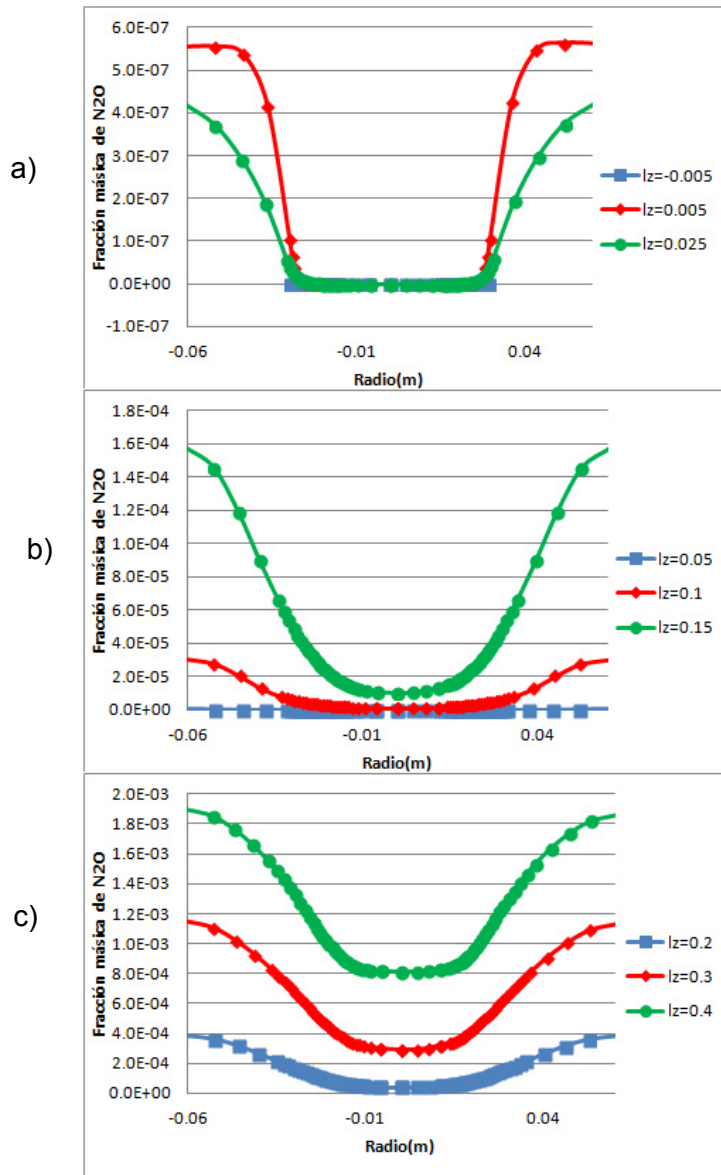


Figura 3. 13 Perfiles de Fracción másica de NO (Gráfica a): $z=-0.005\text{m}$ $z=0.005\text{m}$ $z=0.025\text{m}$, Gráfica b): $z=0.05\text{m}$ $z=0.1\text{m}$ $z=0.15\text{m}$ Gráfica c): $z=0.2\text{m}$ $z=0.3\text{m}$ $z=0.4\text{m}$)

3.4.3.2. EMISIONES DE N₂O

En el caso de los N₂O la formación ocurre de manera similar que con los NO. Aunque en este caso si se produce N₂O como producto de la combustión del fuel. Observe se la línea posición z=0.025, en la gráfica a. En esta posición existen dos zonas simétricas, respecto al eje de la cámara, situadas en la zona de llama. Sin embargo las concentraciones de N₂O son mucho menores que para los NO.

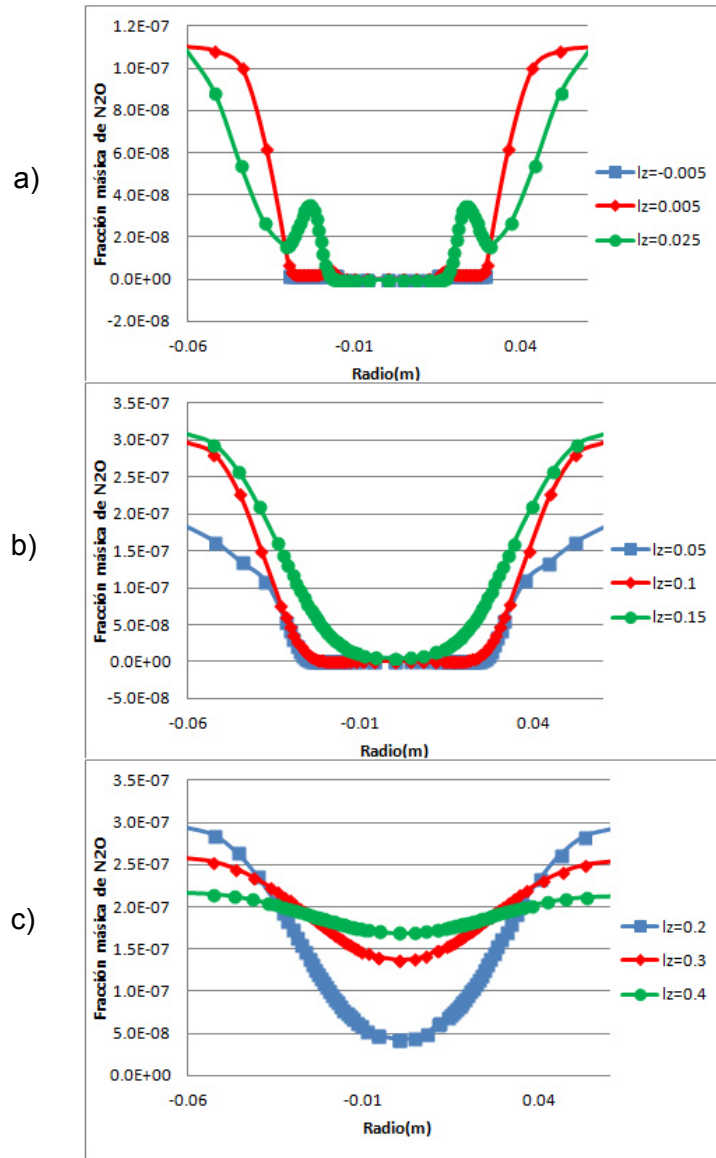


Figura 3. 14 Perfiles de Fracción másica de N₂O (Gráfica a): z=-0.005m z=0.005m z=0.025m, Gráfica b): z=0.05m z=0.1m z=0.15m Gráfica c): z=0.2m z=0.3m z=0.4m)



[ANÁLISIS PARAMÉTRICO]

4.1. INTRODUCCIÓN

En el presente capítulo se expondrán dos casos de dos llamas con distinto dosado y la variación de los distintos parámetros en función del dosado. A continuación se compararan los dos casos con el caso de llama estequiométrica. Esta comparación permitirá extraer conclusiones sobre los distintos dosados y conocer las ventajas e inconvenientes de cada caso. Todas las gráficas se encuentran en SI.

4.2. LLAMA RICA (DOSADO $\Phi=1.2$)

Cuando se modifica la concentración de la mezcla es necesario generar un nuevo PDF. Fluent nos permite crear una nueva tabla dentro del modelo especies para las nuevas condiciones de contorno.

Las condiciones de contorno son las mismas que para el caso estequiométrico ($\Phi=1$). La única diferencia está en el dosado ($\Phi=1.2$) que equivale a una concentración de 28,1% en CH_4 y un 71.9% de inerte.

Tabla 4. 1 Condiciones de contorno de entrada para $\Phi=1.2$

	Combustible	Comburente
Inyección	Tobera Central	Tobera Anular
Diámetro (mm)	0-15	15-31
Fracción másica	28,1%CH4 71,9%Add	22% O2 78% N2
Temperatura ($^{\circ}\text{K}$)	3.0000E+02	1.2000E+03
Densidad (Kg/m^3)	6.5267E-01	2.9452E-01
Velocidad (m/s)	6.6000E-01	1.5400E+00
Caudal (m^3/s)	3.2398E-04	3.0480E-03
Gasto (Kg/s)	2.1145E-04	8.9767E-04
Intensidad Turbulenta (%)	1.2000E+01	7.5000E+00
Conductividad Térmica (W/m/K)	Mixing-law	
Viscosity (kg/m/s)	Mixing-law	
Molecular Weight (kg/kmol)	1.6000E+01	2.8880E+01

En la Figura 4.1 se observan los contornos de velocidad axial para el caso de llama rica y en la Figura 4.2 los perfiles para distintas posiciones en el eje Z. En la Figura 4.1 se puede observar que existen ZRE en las esquinas de la cámara de combustión pero no se alcanza la ZRI.

Esto último se puede comprobar en los perfiles de velocidad, sólo en las zonas cercanas a las paredes de la cámara de combustión se dan valores negativos de la velocidad (posición $z=0.025\text{m}$). El valor mínimo en la zona central es positivo y se alcanza para la posición $z=0.1\text{m}$.

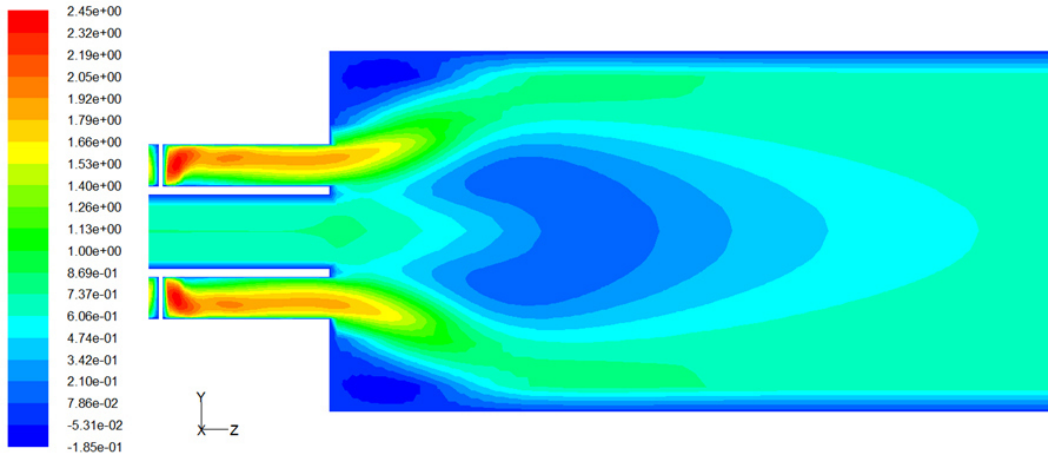


Figura 4. 1 Contornos de Velocidad Axial para $\Phi=1.2$

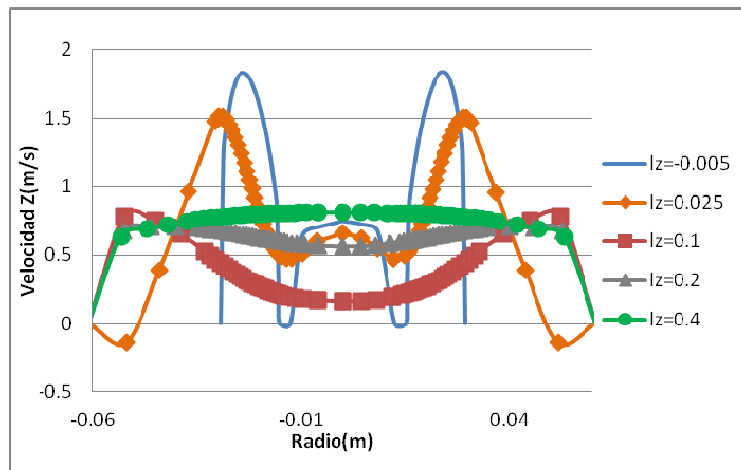


Figura 4. 2 Perfiles de Velocidad Axial para $\Phi=1.2$

En la Figura 4.3 se observan los contornos de temperatura para el caso de llama rica. La temperatura máxima alcanzada en la cámara de combustión se encuentra en torno a 2190K . En la Figura 4.4 para la posición $z=0.025\text{m}$ la temperatura máxima no se encuentra en la zona de la llama. En esta posición las temperaturas máximas se alcanzan en las paredes de la cámara de combustión, por la recirculación del flujo en esta zona. Sin embargo a medida que se avanza en la cámara de combustión la temperatura se va haciendo más uniforme hasta la posición $z=0.4\text{m}$. Las temperaturas más altas en toda la cámara se concentran cerca de las paredes de la cámara de combustión.

Análisis Paramétrico

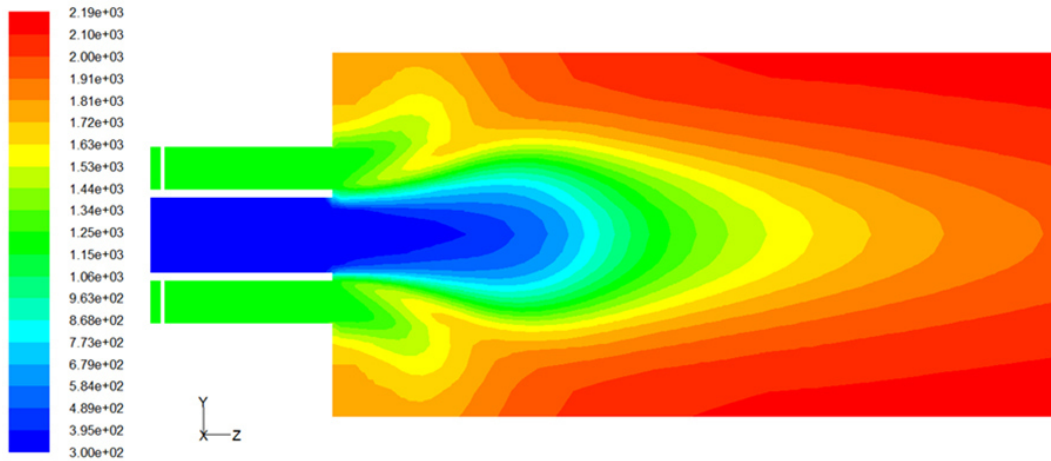


Figura 4. 3 Contornos de Temperaturas para $\Phi=1.2$

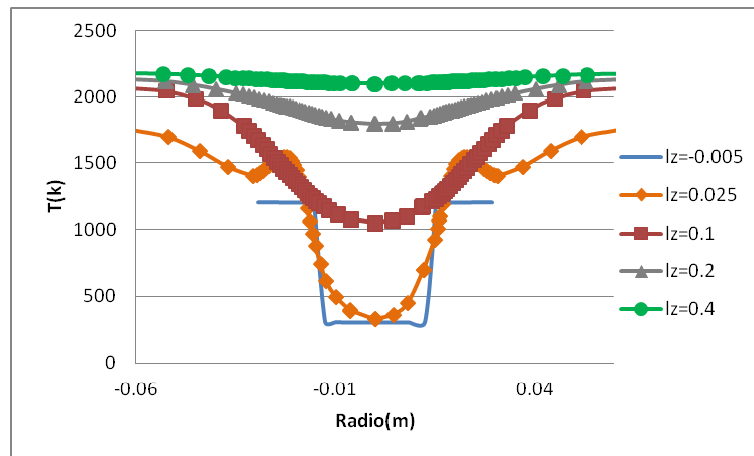


Figura 4. 4 Perfiles de Temperaturas para $\Phi=1.2$

En la Figura 4.5 se muestran los contornos de fracción másica de CH_4 y en la Figura 4.6 las gráficas para las distintas posiciones para el caso de llama rica. Se puede observar que al igual que ocurría en la llama estequiométrica la cantidad de CH_4 disminuye al mezclarse con el aire y por efecto de la combustión en la cámara.

La concentración inicial es mayor que para el caso estequiométrico por tanto se trata de una mezcla con exceso de combustible. El resultado, es que existe una parte de este combustible (CH_4) que no llega a quemarse aumentando por tanto la cantidad de inquemados de CH_4 . El CH_4 inquemado para la llama rica asciende a 0.0117 de fracción másica de CH_4 lo que equivale a 11700ppm.

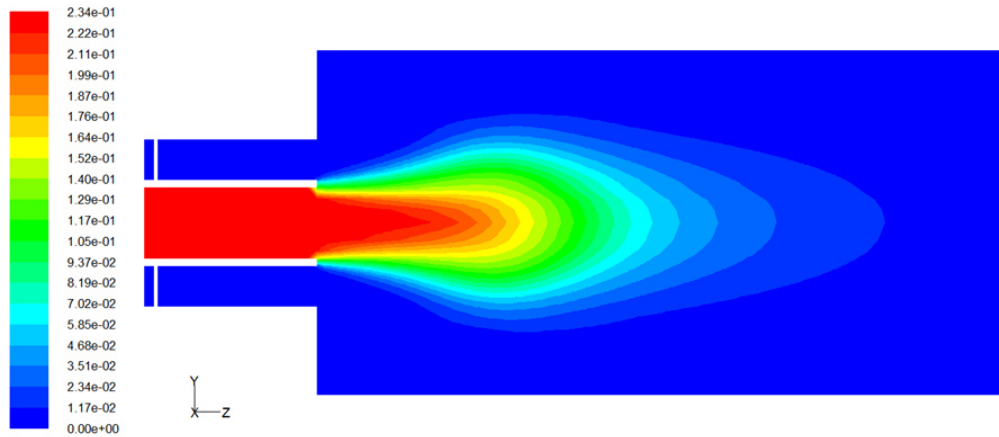


Figura 4. 5 Contornos de Fracción másica de CH_4 para $\Phi=1.2$

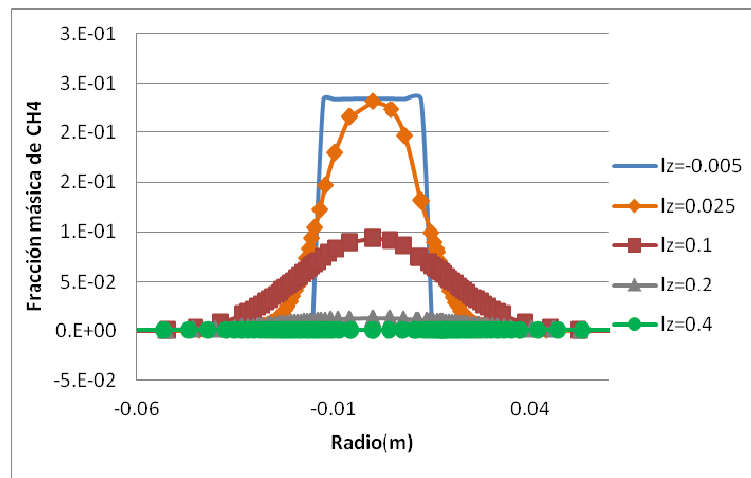


Figura 4. 6 Perfiles de Fracción másica de CH_4 para $\Phi=1.2$

En los próximos apartados se comprobará como afecta el dosado a las emisiones de inquemados y otros agentes contaminantes como CO, CO₂ y NOx.

4.3. LLAMA POBRE (DOSADO $\Phi=0.8$)

Para las nuevas condiciones de contorno es necesario volver a crear un nuevo PDF. En este apartado se realiza una simulación para el caso de llama pobre ($\Phi=0.8$).

Tabla 4. 2 Condiciones de contorno de entrada para $\Phi=0.8$

	Combustible	Comburente
Inyección	Tobera Central	Tobera Anular
Diámetro (mm)	0-15	15-31
Fracción másica	18,7%CH ₄ 81,3%Add	22% O ₂ 78% N ₂
Temperatura (°K)	3.0000E+02	1.2000E+03
Densidad (Kg/m ³)	6.5267E-01	2.9452E-01

Análisis Paramétrico

Velocidad (m/s)	6.6000E-01	1.5400E+00
Caudal (m^3/s)	3.2398E-04	3.0480E-03
Gasto (Kg/s)	2.1145E-04	8.9767E-04
Intensidad Turbulenta (%)	1.2000E+01	7.5000E+00
Conductividad Térmica (W/m/K)	Mixing-law	
Viscosity (kg/m/s)	Mixing-law	
Molecular Weight (kg/kmol)	1.6000E+01	2.8880E+01

Se sabe por los trabajos realizados por otros autores que al aumentar la concentración de O_2 en la mezcla las emisiones de CO_2 y sobre todo de NO_x aumentan [Merlo, 2014]. Algunos van más allá y aseguran que el CO_2 aumenta de manera lineal con el O_2 y que las emisiones de NO_x son más sensibles al exceso de oxígeno a mayores niveles de O_2 [Wu, 2010].

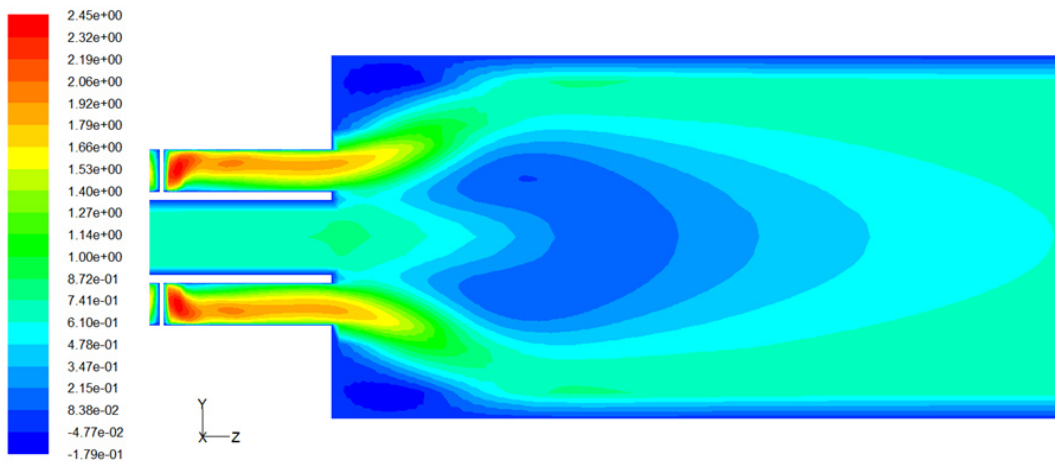


Figura 4. 7 Contornos de Velocidad Axial para $\Phi=0.8$

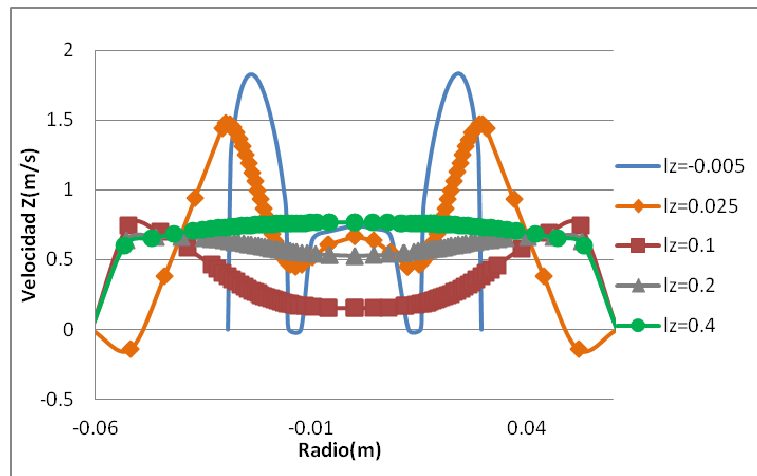


Figura 4. 8 Perfiles de Velocidad Axial para $\Phi=0.8$

En la Figura 4.7 se puede comprobar que, al igual que en los casos anteriores, existe ZRE en las esquinas de la cámara de combustión. En cambio no se alcanza ZRI. Aunque existe una pequeña zona de un azul más oscuro, no obstante, no alcanza valores negativos de la velocidad axial en la zona central de la cámara de combustión.

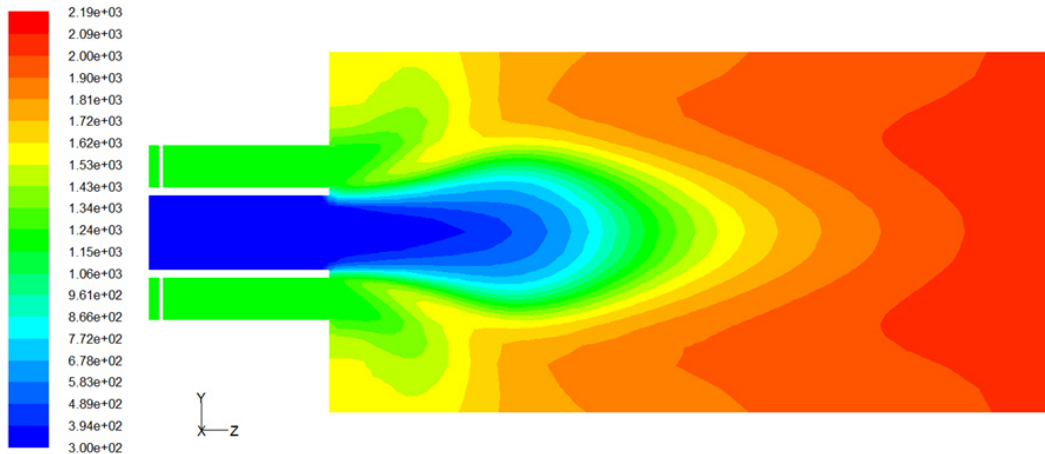


Figura 4. 9 Contornos de Temperaturas para $\Phi=0.8$

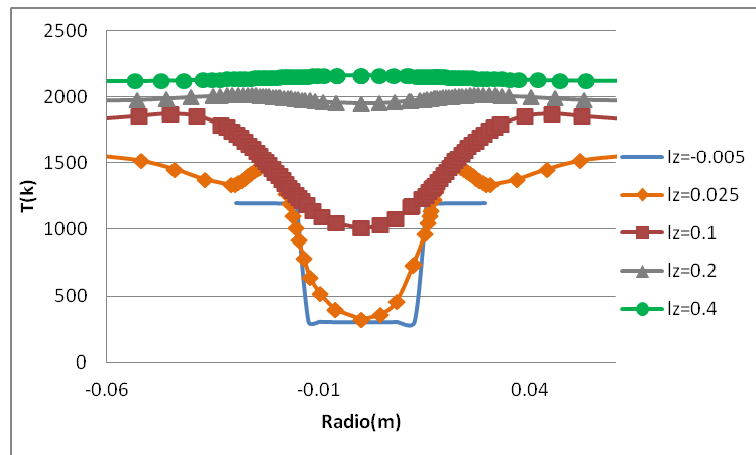


Figura 4. 10 Perfiles de Temperaturas para $\Phi=0.8$

En la Figura 4.9 y 4.10 se muestra el contorno de temperaturas y el perfil de temperaturas para la llama pobre, respectivamente. A la vista de las figuras se ve que los contornos son mucho más perpendiculares al eje de la cámara que para los demás dosados hasta ahora vistos. El aumento de la temperatura en la cámara de combustión se produce de forma más gradual alcanzando antes una temperatura prácticamente uniforme (posición $z=0.02m$).

Análisis Paramétrico

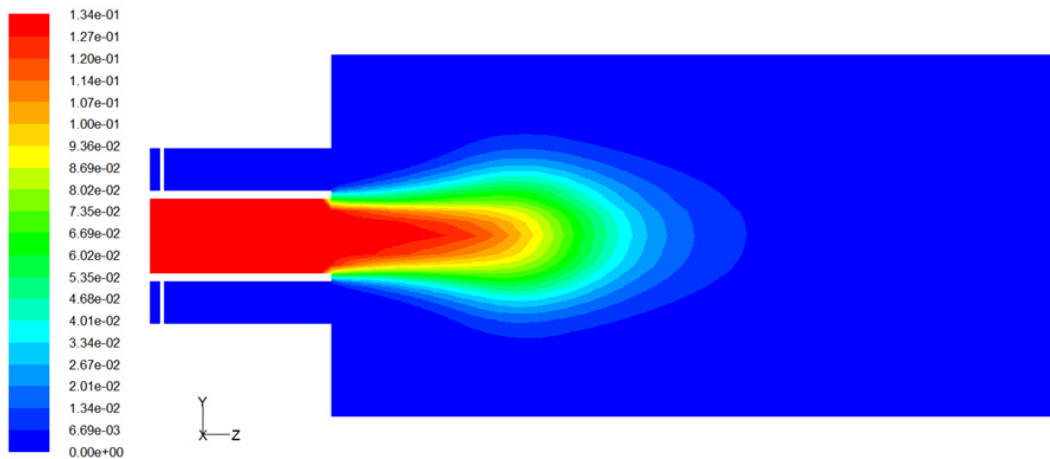


Figura 4. 11 Contornos de Fracción másica de CH_4 para $\Phi=0.8$

En la Figura 4.11 se muestran los contornos de fracción másica de CH_4 . En ellos se observa como el CH_4 entra en la cámara de combustión y se mezcla con el aire. Cuando alcanza la flamabilidad la mezcla, se inicia la llama, consumiéndose rápidamente el CH_4 . Se ve como para las posiciones entre $0.25D$ y $0.75D$ en torno al eje de la cámara se produce un elevado gradiente que indica la posición de la llama.

Si ahora nos fijamos en la Figura 4.12 entre la posición $z=0.025$ y $z=0.1\text{m}$ se produce un elevado descenso de la fracción másica de CH_4 alcanzando valores cercanos al cero ya en la posición $z=0.2\text{m}$.

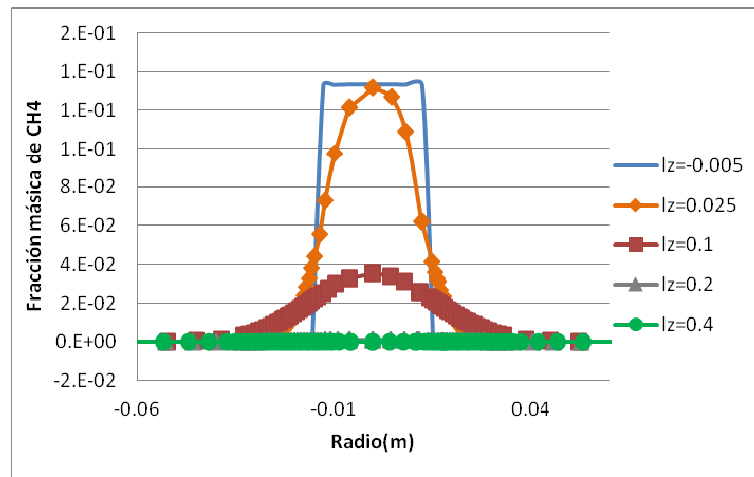


Figura 4. 12 Perfiles de Fracción másica de CH_4 para $\Phi=0.8$

Será de interés la comparación de estas gráficas y contornos para los casos de llama estequiométrica, llama rica ($\Phi=1.2$) y llama pobre ($\Phi=0.6$). De esta manera se podrán observar mejor las diferencias y obtener conclusiones.

4.4. INFLUENCIA DEL DOSADO

En el presente apartado se procederá a comparar los tres casos hasta ahora expuestos con el fin de observar las diferencias en cuanto a una serie de parámetros. Los parámetros que se comparan son la temperatura, la velocidad tanto axial como tangencial y las emisiones e inquemados. En este último apartado se incluyen inquemados de CH_4 , emisiones de CO_2 , CO y NO_x .

Una vez realizada las comparativas de cada parámetro se obtendrán las conclusiones propias de cada caso. Estas se recogerán en el último capítulo como conclusiones finales del presente TFG.

4.4.1. INFLUENCIA SOBRE LA TEMPERATURA

En la Figura 4.13 se comparan los contornos de temperatura de las tres llamas rica (gráfica a), estequiométrica (gráfica b) y pobre (gráfica c). Inicialmente las condiciones son iguales, sin embargo, una vez se alcanza la cámara de combustión existen diferencias.

Por un lado la temperatura máxima es distinta para $\Phi=1$. Para este caso la temperatura máxima alcanza los 2310K, mientras que para los dosados $\Phi=1.2$ y $\Phi=0.8$ alcanza una temperatura de 2190K.

El aumento de la temperatura ocurre mucho más rápido para el caso $\Phi=0.8$ y $\Phi=1.2$. Se observa en la gráfica c cómo los contornos de temperaturas son mucho más verticales para la llama pobre. Se produce por tanto un aumento más uniforme de la temperatura a lo largo de la cámara de combustión. Además se alcanza la temperatura máxima en el centro de la cámara de combustión.

En cambio para la llama rica (gráfica a), los contornos son mucho más horizontales. Esto provoca que las mayores temperaturas se den en las paredes de la cámara de combustión. Si tenemos en cuenta que éstas temperaturas elevada se alcanza mucho antes que para los otros dos dosados, tenemos una amplia zona de las paredes de la cámara expuesta a una elevada temperatura. A la larga esto podría suponer un problema si el material de las paredes no es lo suficientemente resistente a elevadas temperaturas. También influye en el mantenimiento del quemador aumentando la acumulación de cenizas.

Si se trata de un quemador para una industria la vida útil de los materiales y el mantenimiento son factores muy importantes a tener en cuenta.

Análisis Paramétrico

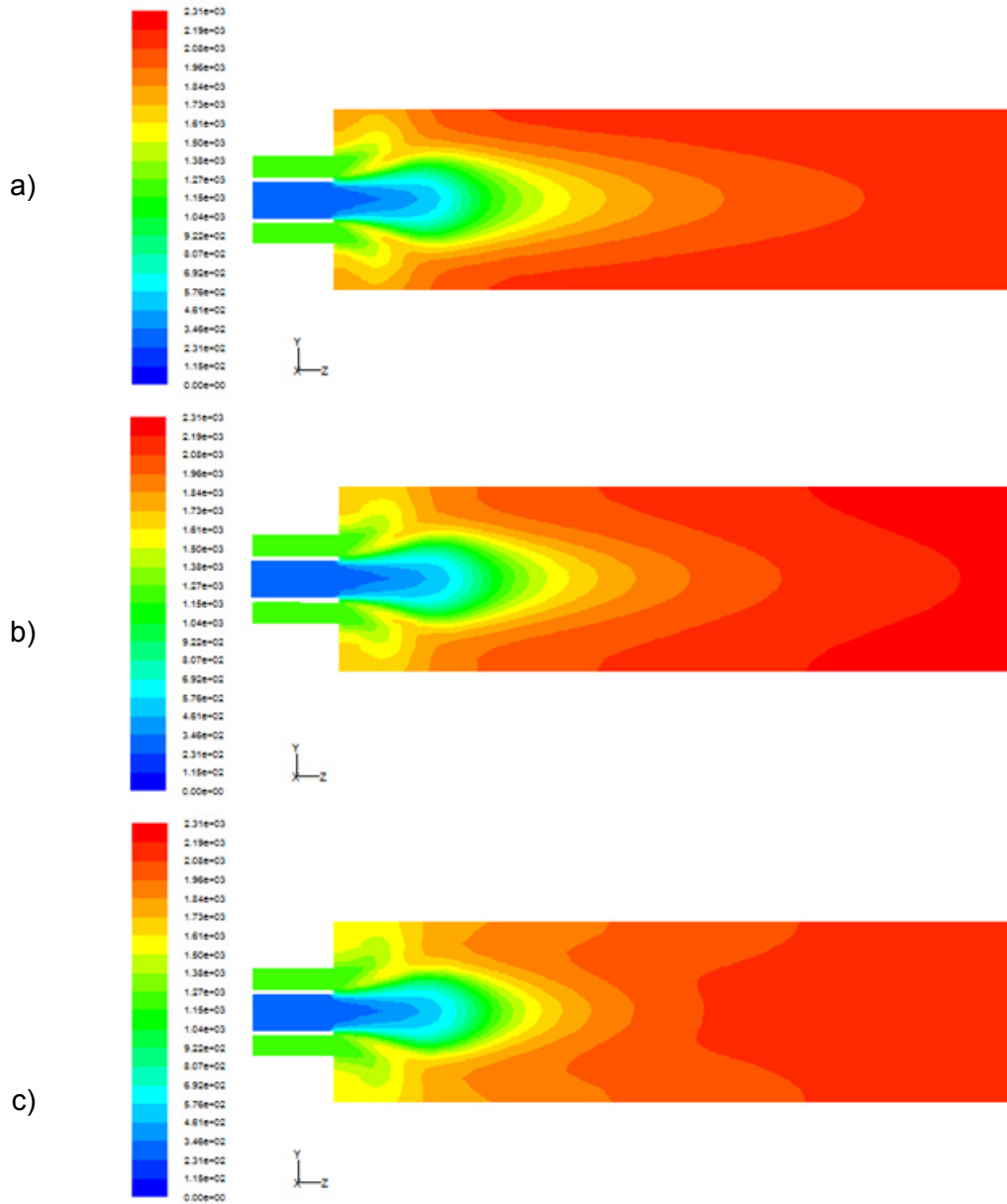


Figura 4. 13 Contornos de Temperatura (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

Se puede comprobar en la Figura 4.14 que las tres llamas parten de las mismas condiciones de contorno de temperatura (gráfica a). Es a partir de la posición $z=0.025\text{mm}$ (gráfica b) donde empieza a haber diferencias entre los distintos dosados, siendo éstas más importantes en las paredes de la cámara.

Otra diferencia que podemos observar en la Figura 4.14 es que la temperatura aumenta mucho más rápido en la zona central para la el $\Phi=0.8$ (gráfica c) que para los otros dos casos. Sin embargo a medida que se avanza en la cámara de combustión la llama $\Phi=1$ alcanza una mayor temperatura final. Sería interesante para trabajos futuros ensayar dosados entre 0.8 y 1. Es posible que se alcancen temperaturas similares o incluso más altas que para el caso estequiométrico.

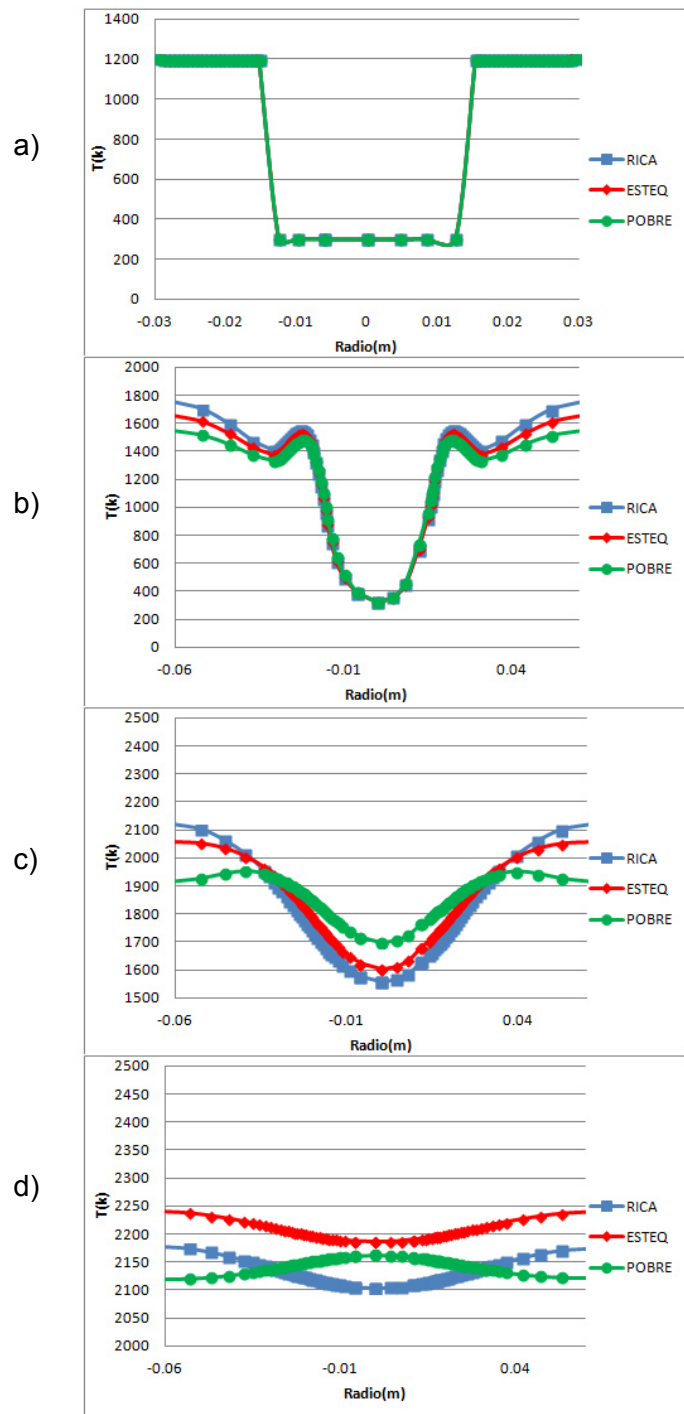


Figura 4. 14 Perfiles de Temperatura (Gráfica a) $l_z = -0.005m$, Gráfica b) $l_z = 0.025m$, Gráfica c) $l_z = 0.15m$, Gráfica d) $l_z = 0.4m$)

4.4.2. INFLUENCIA SOBRE LA VELOCIDAD

En este subapartado se evaluarán los contornos de la velocidad axial y tangencial, así como las gráficas correspondientes para los tres casos de llama.

4.4.2.1. VELOCIDAD AXIAL

En la Figura 4.15 se muestran los contornos de velocidad axial para los tres casos de llama. Se observa que al igual que en el apartado anterior las condiciones de contorno para la velocidad axial son las mismas para los tres casos. Es decir, velocidad axial del combustible 0.66m/s y velocidad del comburente 1.54m/s. Para los tres casos se comprueba que existe ZRE y no existe ZRI.

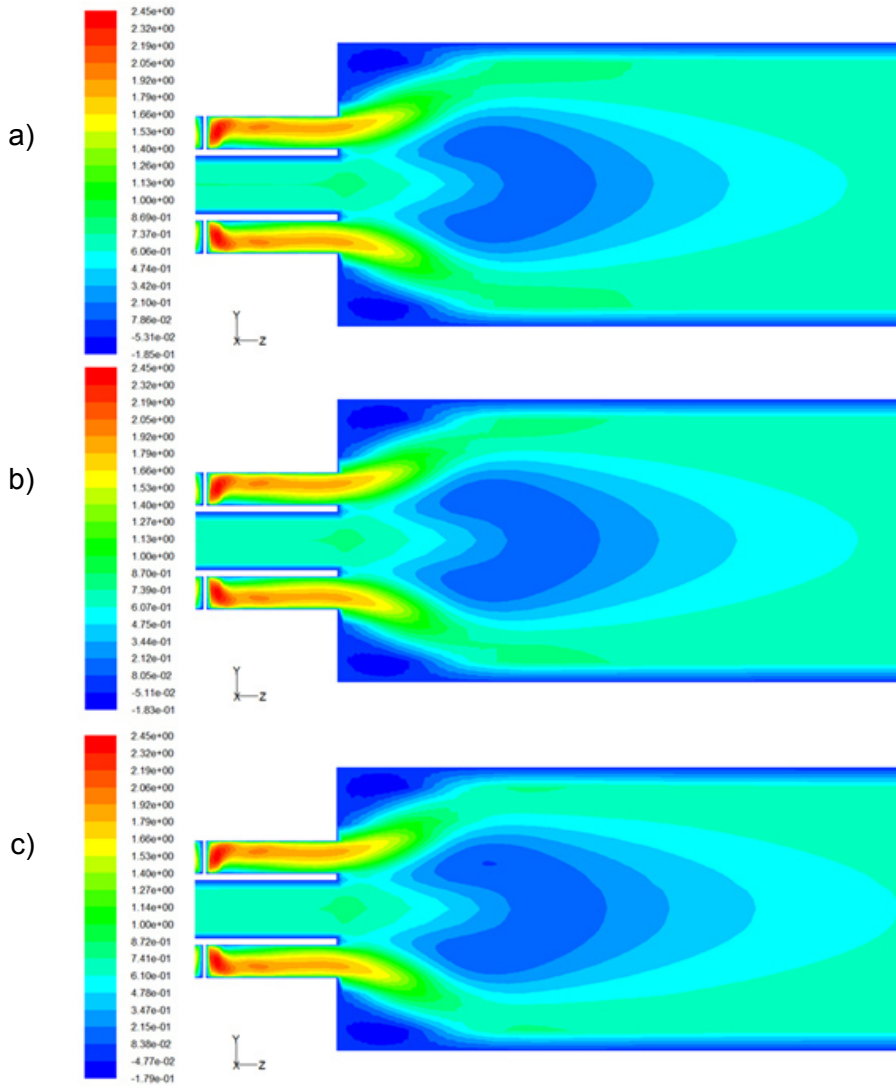


Figura 4. 15 Contornos de Velocidad Axial (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

Si ahora se fija la vista en la Figura 4.16 se ve que apenas hay diferencias en cuanto a los perfiles de velocidad para los tres casos de llama. Si se aprecia una ligera diferencia de la llama $\Phi=0.8$ a medida que se avanza hacia el final de la cámara de combustión. Siendo la velocidad de ésta algo menor que las otras dos en algo menos de 0.05m/s.

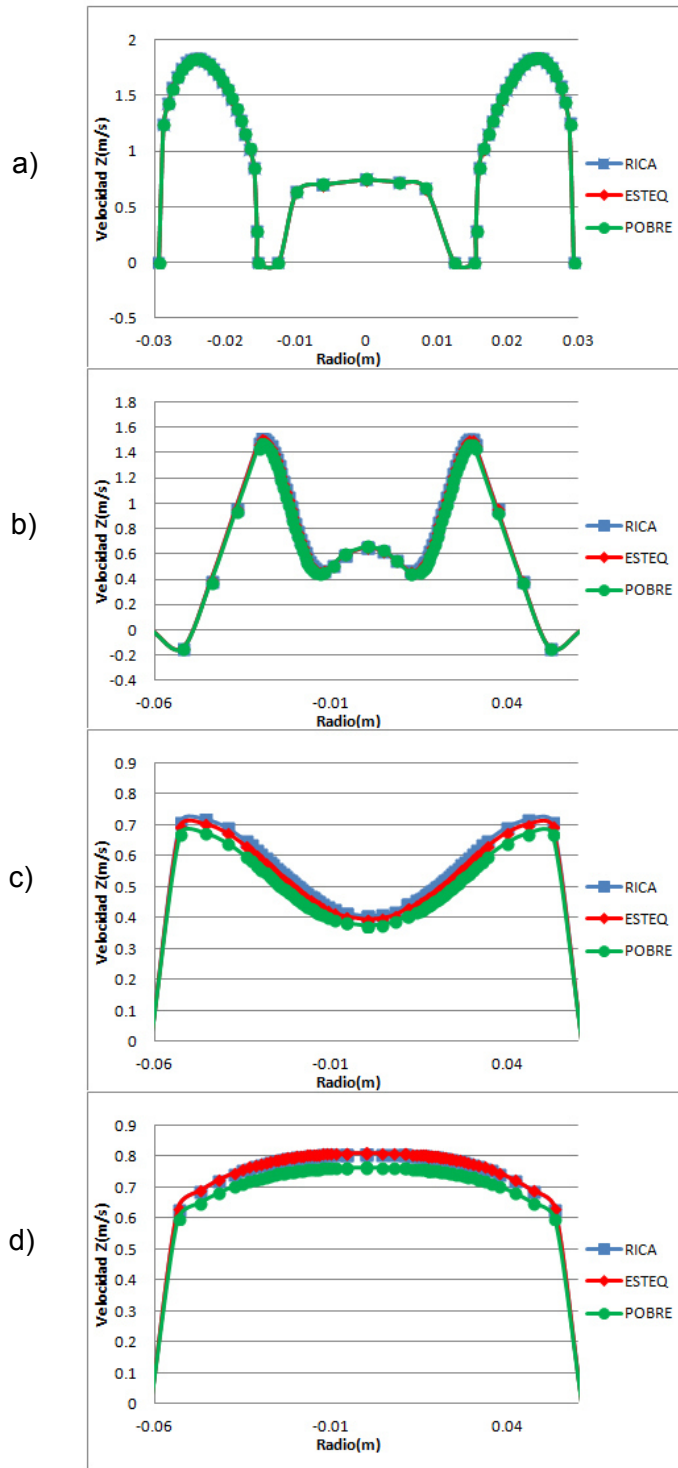


Figura 4. 16 Perfiles de Velocidad Axial (Gráfica a) $l_z = -0.005\text{m}$, Gráfica b) $l_z = 0.025\text{m}$, Gráfica c) $l_z = 0.15\text{m}$, Gráfica d) $l_z = 0.4\text{m}$)

Por tanto se observa que el efecto del dosado no es importante sobre la velocidad axial al menos en estos valores. Podría ser un factor importante a tener en cuenta si se sigue esta tendencia.

4.4.2.2. VELOCIDAD TANGENCIAL

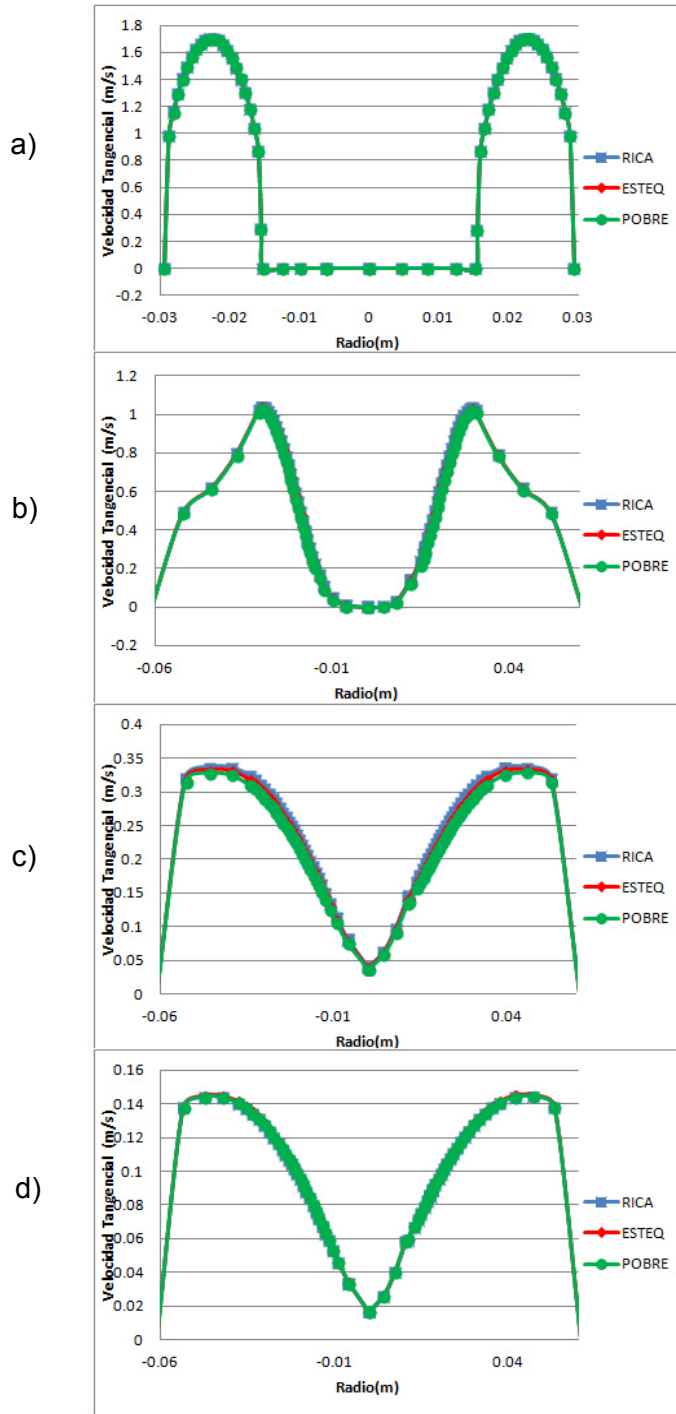


Figura 4. 17 Perfiles de Velocidad Tangencial (Gráfica a) $l_z = -0.005m$, Gráfica b) $l_z = 0.025m$, Gráfica c) $l_z = 0.15m$, Gráfica d) $l_z = 0.4m$)

En la Figura 4.17 se compara la velocidad tangencial para los tres casos de llama. La componente tangencial solo se imprime al comburente, ya que es en la tubería exterior en la que se sitúa el generador de Swirl.

La componente tangencial aumenta en el centro de la cámara a medida que se avanza por esta, esto se debe a la existencia de un transporte hacia la zona central. El fluido se frena en la zona próxima a las paredes por la viscosidad del fluido y la componente tangencial es muy baja en esta zona.

La velocidad tangencial no se modifica a pesar de los cambios en el dosado del combustible. Las condiciones a la entrada (gráfica a) de la cámara de combustión son idénticas para los tres casos y vuelven a ser lo a la salida. Existen ligeras diferencias en el interior de la cámara (gráfica b y c) pero desaparecen cuando se alcanza la salida (gráfica d).

En este apartado se concluye que el efecto del dosado sobre la velocidad tanto axial como tangencial es despreciable. No es un parámetro por tanto dependiente del dosado.

4.4.3. INFLUENCIA SOBRE LAS EMISIONES E INQUEMADOS

En el presente apartado se comparan las emisiones de las distintas especies que aparecen en la combustión del CH_4 para los tres casos de llama. Las especies que se comparan son el CH_4 inquemado, el CO , el CO_2 y los NO_x . Los cuales incluyen (N_2O y NO).

En la Figura 4.18 se comparan los contornos de la fracción másica de CH_4 . Lo primero que se comprueba es que las condiciones no son iguales para los tres casos. La variación del dosado está directamente relacionado con la variación de la concentración de CH_4 como se explicó en el capítulo anterior. Por tanto para un dosado $\Phi=1.2$ la concentración de CH_4 es de 28.1% lo que equivale a un 0.281 en fracción másica; un dosado $\Phi=1$ equivale a una concentración de 23.4% y una fracción de 0.234; un dosado $\Phi=0.8$ equivale a una concentración de 18.7% y una fracción de 0.187.

Sin embargo si se atiende a la gráfica a de la Figura 4.19 vemos que las fracciones de CH_4 son más bajas para todos los casos. En la gráfica a la fracción másica para el dosado $\Phi=0.8$ es de 0.134 cuando debería ser de 0.187, para el dosado $\Phi=1$ es de 0.184 cuando debería ser de 0.234 y para el dosado $\Phi=1.2$ es de 0.234 cuando debería de ser de 0.281. Esto se debe a un error que comete el Fluent por el cual reduce las concentraciones de todas las mezclas. No se ha llegado a una justificación de este error.

Análisis Paramétrico

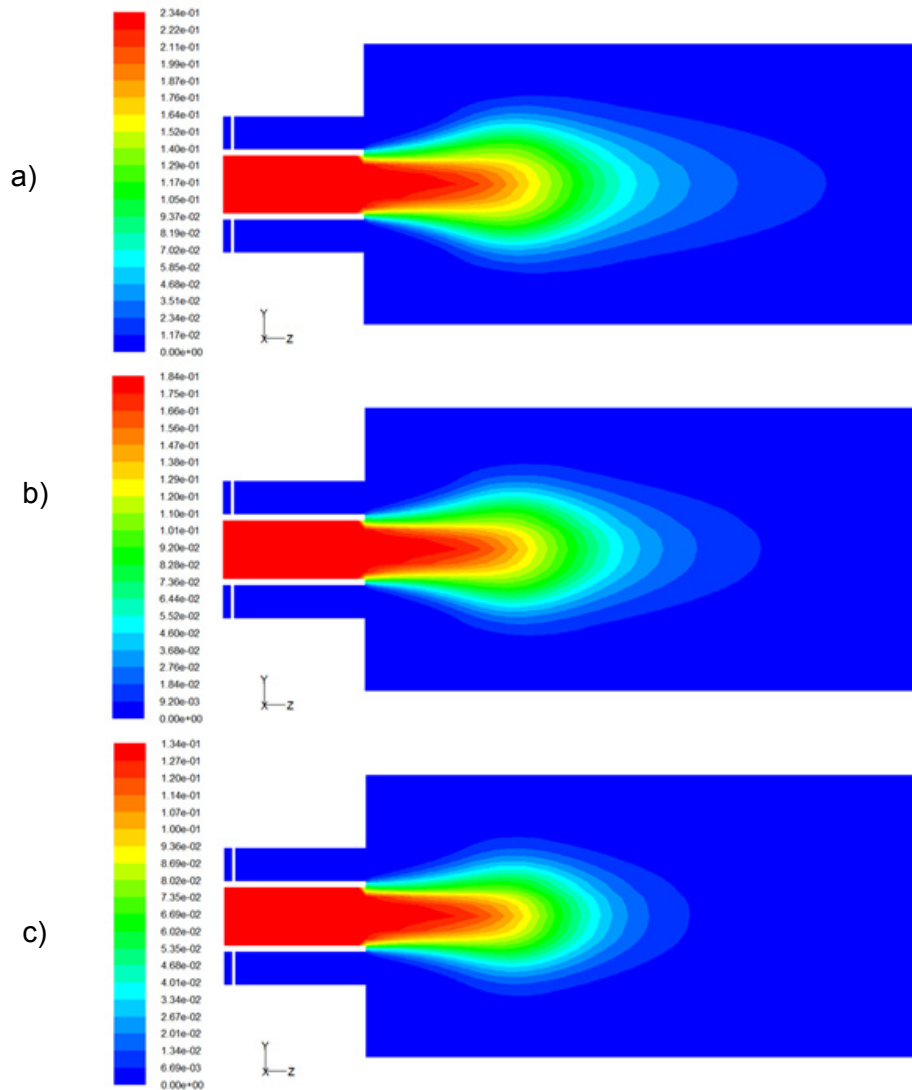


Figura 4. 18 Contornos de Fracción másica de CH₄ (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

Se observa en la Figura 4.18 que el CH₄ se consume antes en la llama $\Phi=0.8$. Si esto lo comprobamos en las gráficas de la Figura 4.19, se verifica que para la posición $z=0.15\text{m}$ la fracción de CH₄ es mucho menor que para los otros dos casos, aunque esto podría deberse a que la fracción inicial es menor.

Sin embargo, en la posición $z=0.4\text{m}$ la línea de círculos es prácticamente horizontal. Es evidente que a menor dosado, menor es la proporción de CH₄ en la mezcla para la misma cantidad de aire y por tanto se consume mayor cantidad del combustible.

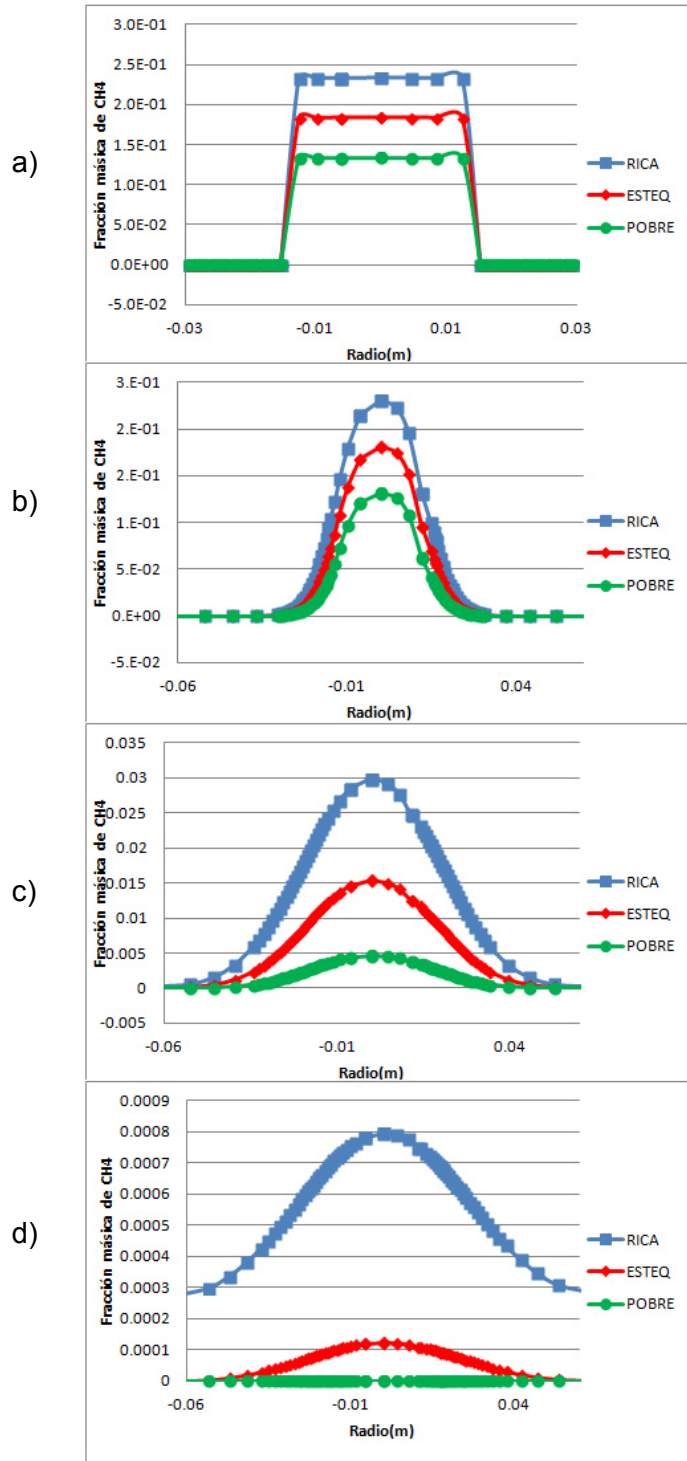


Figura 4. 19 Perfiles de Fracción másica de CH₄ (Gráfica a) lz=-0.005m, Gráfica b) lz=0.025m, Gráfica c) lz=0.15m, Gráfica d) lz=0.4m)

4.4.3.1. EMISIONES DE CO₂

En la Figura 4.20 se observa como para el mayor dosado (gráfica a) la formación de CO₂ es mucho menor que para los dosados $\Phi=1$ y $\Phi=0.8$. Al igual que se hizo en el capítulo anterior solo se estudia la parte de la cámara a partir de la llama, ya que el CO₂ se forma del CO.

Los contornos son mucho más horizontales para la llama estequiométrica (gráfica b). En cambio son verticales para la llama pobre (gráfica c).

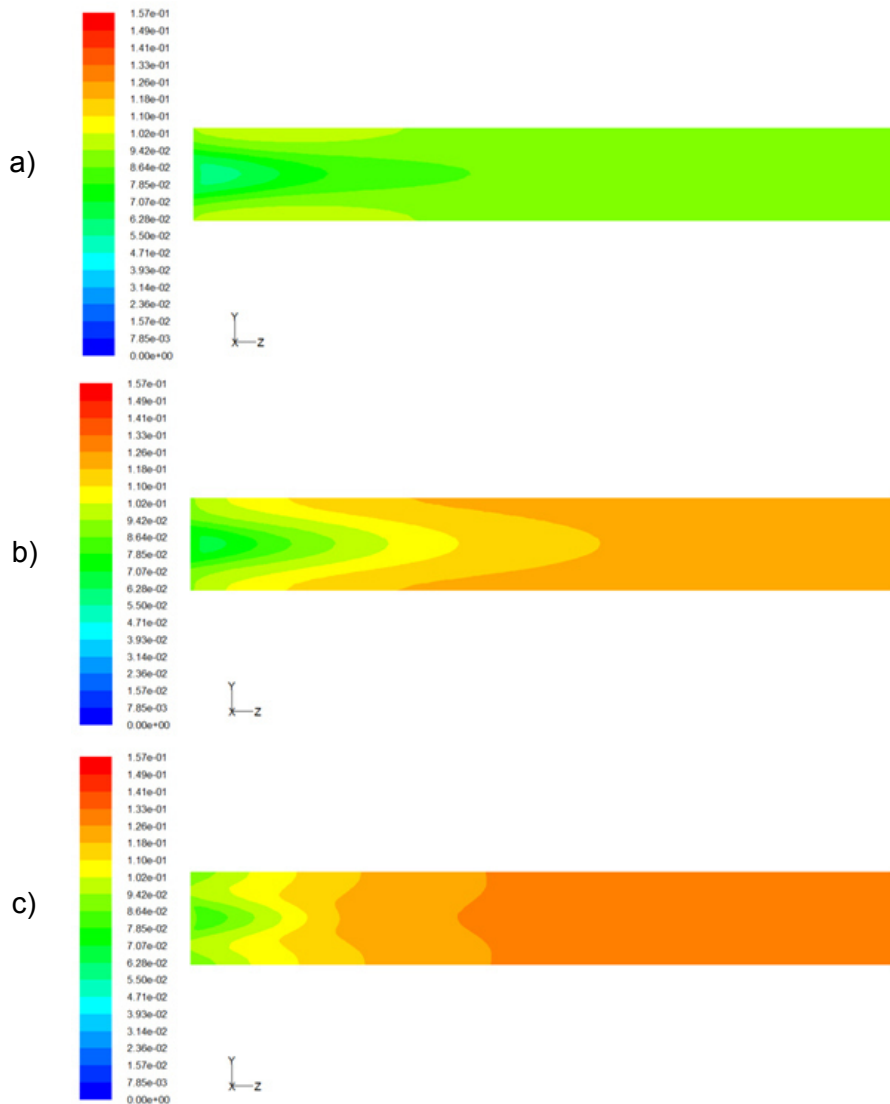


Figura 4. 20 Contornos de Fracción másica de CO₂ (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

En la Figura 4.21 se comparan los perfiles de fracción másica de CO₂. Se observa que las emisiones de esta especie son mayores para una llama $\Phi=0.8$ (línea de círculos gráfica d). Se sabía por los trabajos realizados por otros autores que al aumentar la concentración de O₂ en la mezcla las emisiones de CO₂ aumentan [Merlo, 2014]. Se comprueba que esto es así. Aunque no se confirma que lo haga de manera lineal como indica el autor [Wu, 2010].

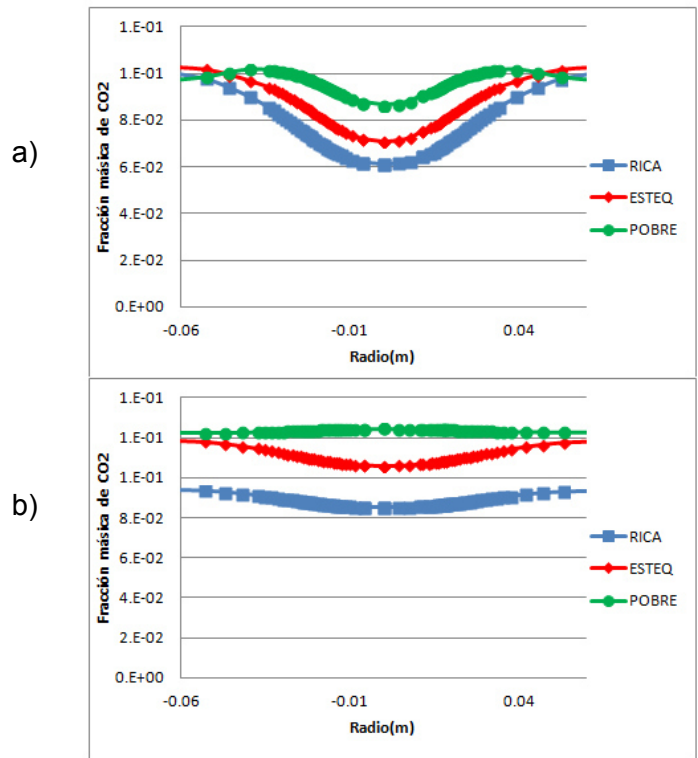


Figura 4. 21 Perfiles de Fracción másica de CO₂ (Gráfica a) lz=0.15m, Gráfica b) lz=0.4m)

Tabla 4. 3 Partes por millón de CO₂

	$\Phi=0.8$	$\Phi=1$	$\Phi=1.2$
CO ₂	133300ppm	125736ppm	90570ppm

Tras extraerse los valores de la tabla 4.3 se concluye que las emisiones disminuyen con el aumento del dosado.

4.4.3.2. EMISIONES DE CO

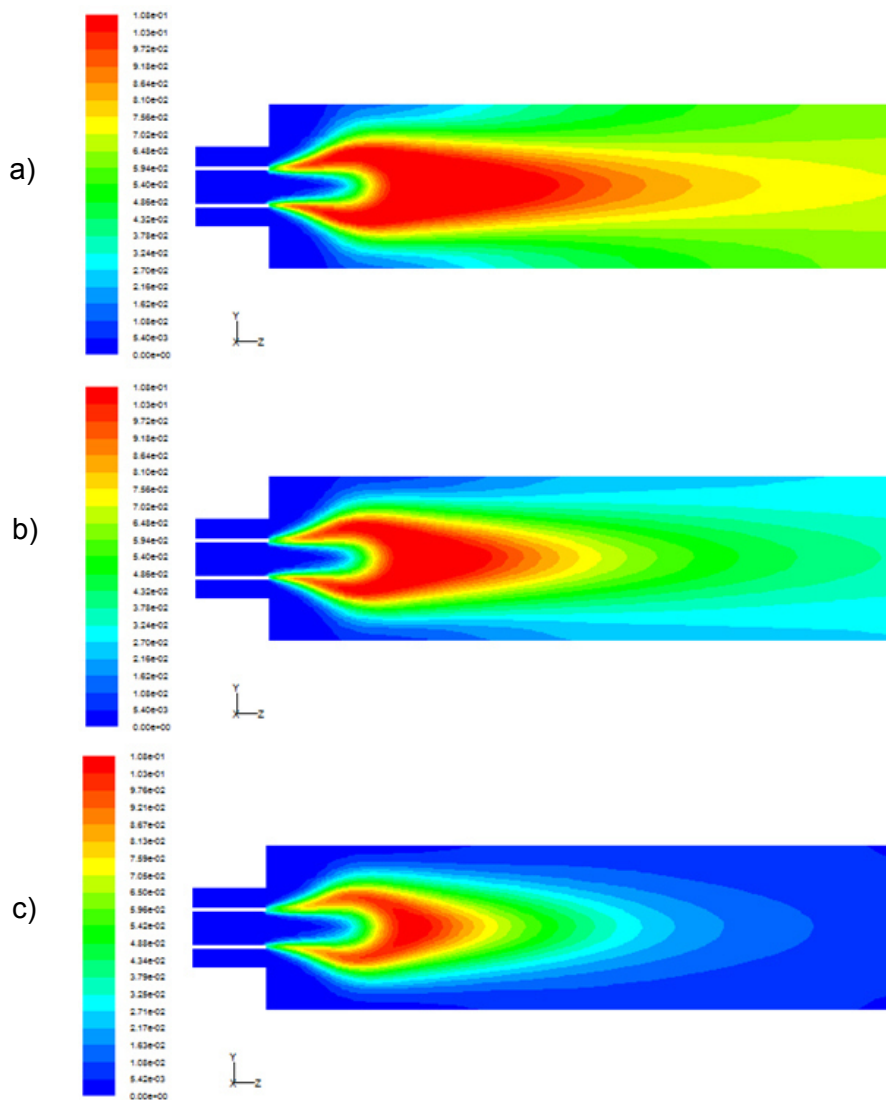


Figura 4. 22 Contornos de Fracción másica de CO (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

Determinados autores recomiendan aumentar la concentración de H_2 en el comburente [Schefer, 2002]. De esta manera el enriquecimiento de metano con hidrógeno aumenta la resistencia a la deformación de llama y reduce la concentración de CO sin afectar negativamente a las emisiones de NOx.

En la Figura 4.22 se puede comprobar cómo se dijo en el párrafo anterior que la concentración de CO es menor a medida que disminuye el dosado. Es decir, cuanto mayor es la proporción de H_2 con respecto al combustible menor es el CO.

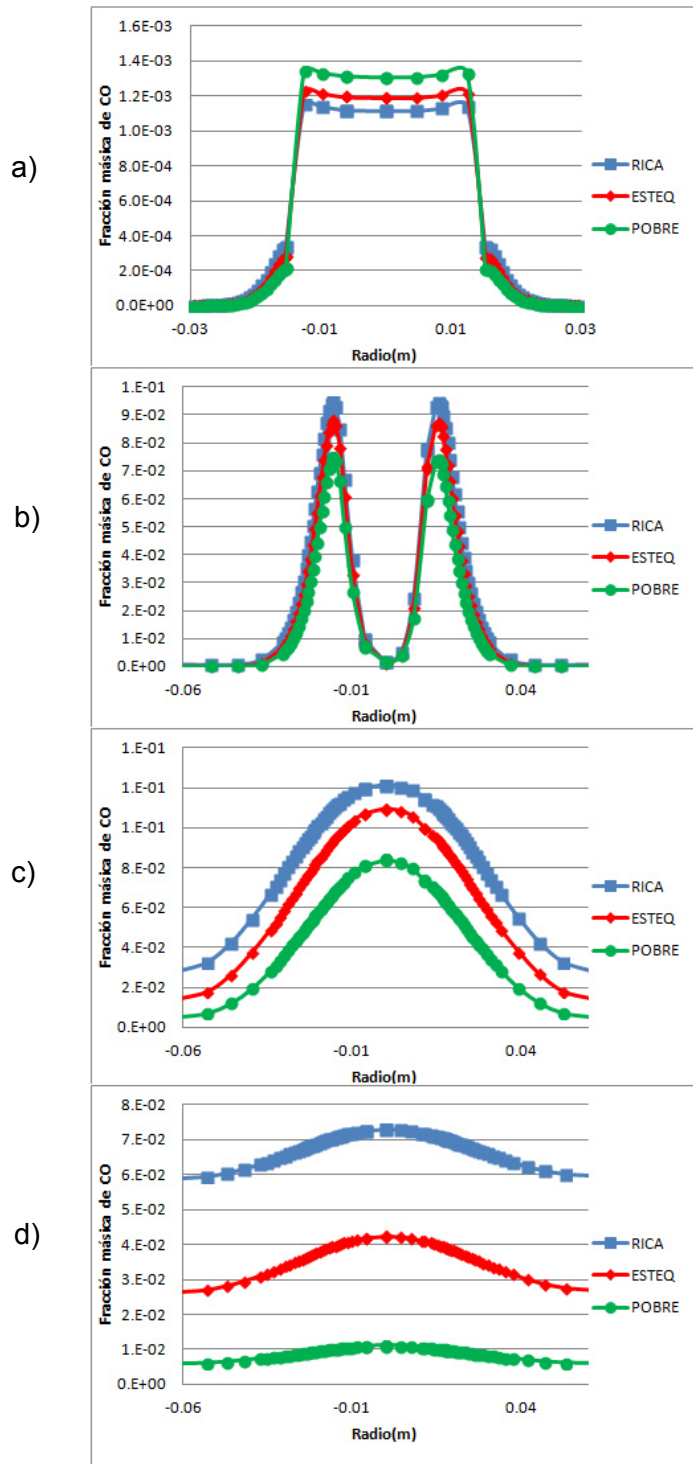


Figura 4. 23 Perfiles de Fracción másica de CO (Gráfica a) $l_z = -0.005\text{m}$, Gráfica b) $l_z = 0.025\text{m}$, Gráfica c) $l_z = 0.15\text{m}$, Gráfica d) $l_z = 0.4\text{m}$)

En la misma Figura 4.22 se puede comprobar también como la zona de mayor concentración de CO es mayor a mayor dosado (zonas rojas de las gráficas a, b y c). Esto implica que el dosado aumenta la zona de formación de CO y por tanto la cantidad de CO.

Esto mismo se puede observar en los perfiles de la Figura 4.23. En ellos esta especie comienza siendo mayor para el caso $\Phi=0.8$ (línea de círculos de la gráfica a) pero en la salida es notablemente menor que para los otros dos casos (gráfica d).

Tabla 4. 4 Partes por millón de CO

	$\Phi=0.8$	$\Phi=1$	$\Phi=1.2$
CO	5419ppm	29840ppm	68400ppm

A la vista de la Tabla 4.4 se advierte una relación entre el dosado y el CO. Siendo el CO directamente proporcional al dosado.

4.4.3.3. EMISIONES DE NO_x

En este apartado se comparan las emisiones de NO Y N₂O para los tres casos de llama. Los efectos de ambos gases son muy perjudiciales tanto para el medio ambiente como para la salud de las personas. Además son gases efecto invernadero por tanto se deben reducir sus emisiones en la medida de lo posible.

En la Figura 4.25 se muestran los perfiles de fracción másica de NO. Para la posición $z=-0.005m$ (gráfica a) la concentración de NO para el caso $\Phi=0.8$ es prácticamente cero y no comienza a aumentar hasta casi la mitad de la cámara de combustión, posición $z=0.15m$ (gráfica c). Por lo que el NO predominante es el que se obtiene por formación térmica y no aparece hasta que se alcanza suficiente temperatura en la cámara de combustión.

Esto mismo ocurre para el caso $\Phi=1.2$ pero en menor medida. Si se observan los contornos de la Figura 4.24 y se comparan las gráficas a y c se ve que el NO se forma cerca de las paredes de la cámara de combustión.

Para el caso de dosado $\Phi=1.2$ esto ocurre de manera mucho más rápida, empieza a aumentar ya en la posición $z=0.025m$ (gráfica b Figura 4.25), que para el dosado $\Phi=0.8$.

Se comentó en el apartado de la temperatura que para el caso rico las mayores temperaturas se dan en las paredes de la cámara. Por este motivo aparecen mayores concentraciones de NO en esta zona, posición $z=0.15m$. Además la concentración de CH₄ es mayor para este dosado, favoreciendo la formación del NO por los mecanismos de reacción inmediata.

En el caso del dosado $\Phi=1$ la mayor temperatura se da en las paredes de la cámara como ocurre en el dosado $\Phi=1.2$. Teniendo en cuenta que las temperaturas para este caso son mayores que para la llama rica la formación de NO térmico es mucho mayor.

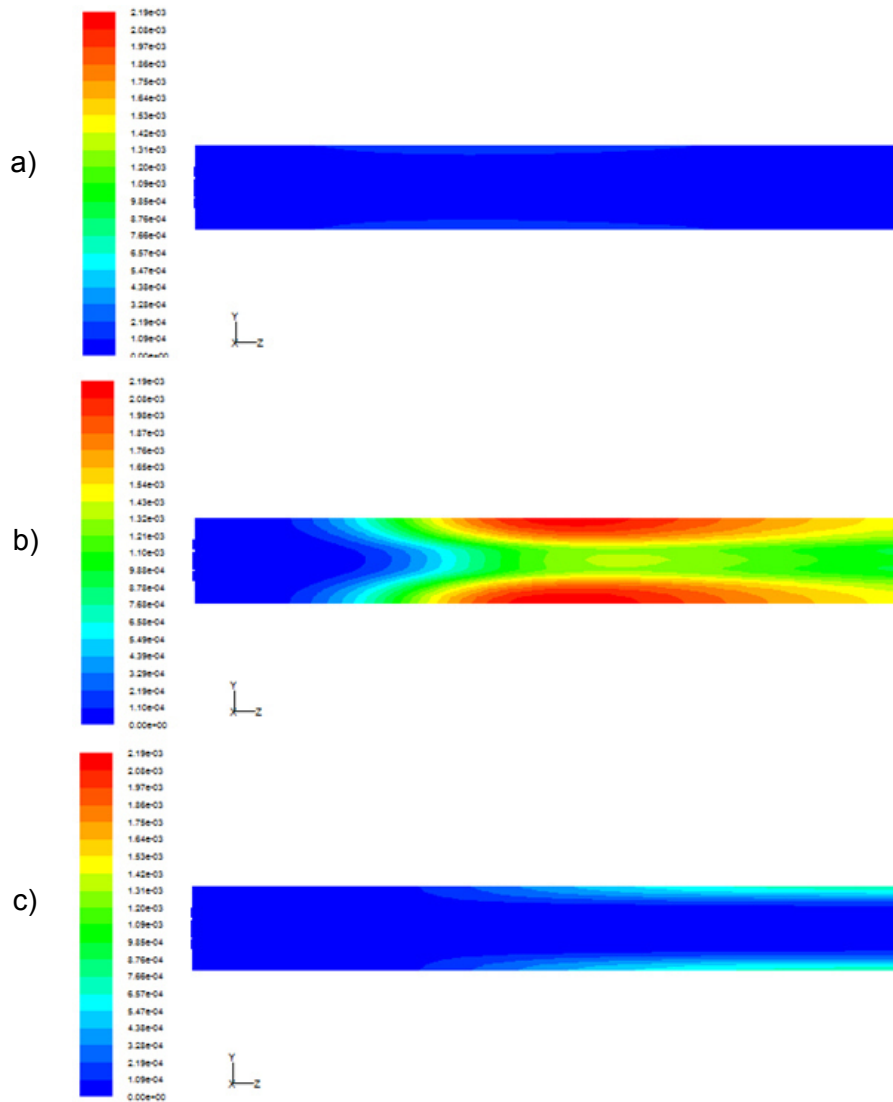


Figura 4. 24 Contornos de Fracción másica de NO (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

Si se cuantifican las emisiones de esta especie (Tabla 4.5), se observa que las menores emisiones de NO se dan para el dosado $\Phi=0.8$ y para el dosado $\Phi=1.2$. Es decir, 72ppm para el dosado $\Phi=0.8$ y 813ppm para el dosado $\Phi=1.2$.

Se concluye por tanto que la fracción másica de NO disminuye a medida que se aleja la concentración del dosado $\Phi=1$ y que es totalmente dependiente de la temperatura. Como se explicó en el capítulo anterior, la formación NOx se duplica por cada incremento en 90K a partir de una temperatura de 2200K.

Tabla 4. 5 Partes por millón de NO

	$\Phi=0.8$	$\Phi=1$	$\Phi=1.2$
NO	72ppm	1536ppm	813ppm

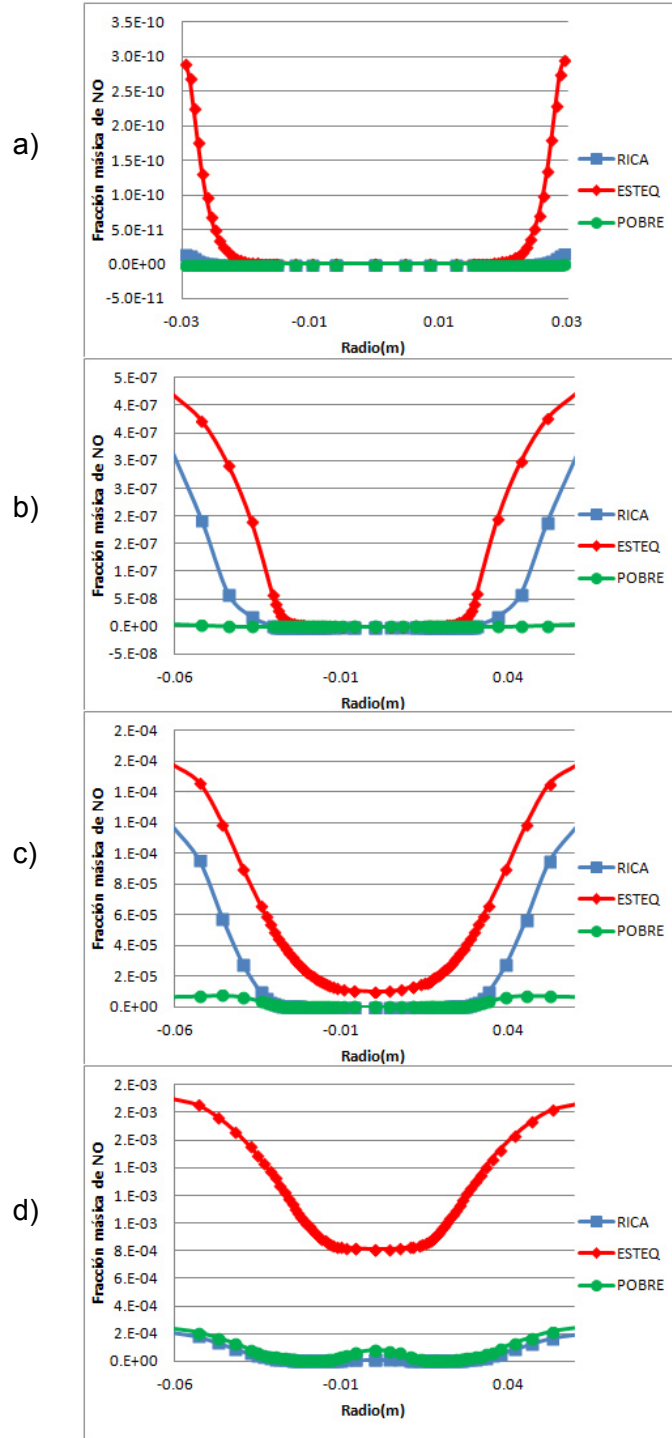


Figura 4. 25 Perfiles de Fracción másica de NO (Gráfica a) $l_z=-0.005m$, Gráfica b) $l_z=0.025m$, Gráfica c) $l_z=0.15m$, Gráfica d) $l_z=0.4m$)

Como ocurría en la especie anterior las mayores concentraciones de N_2O se dan en las paredes de la cámara de combustión. Es decir, las zonas de mayor temperatura para caso rico y estequiométrico. Observando se los contornos de la Figura 4.26 el N_2O aumenta inicialmente en las paredes de la cámara, para el caso pobre. Sin embargo a medida que aumenta la temperatura en la zona central comienza la formación del N_2O también en dicha zona.

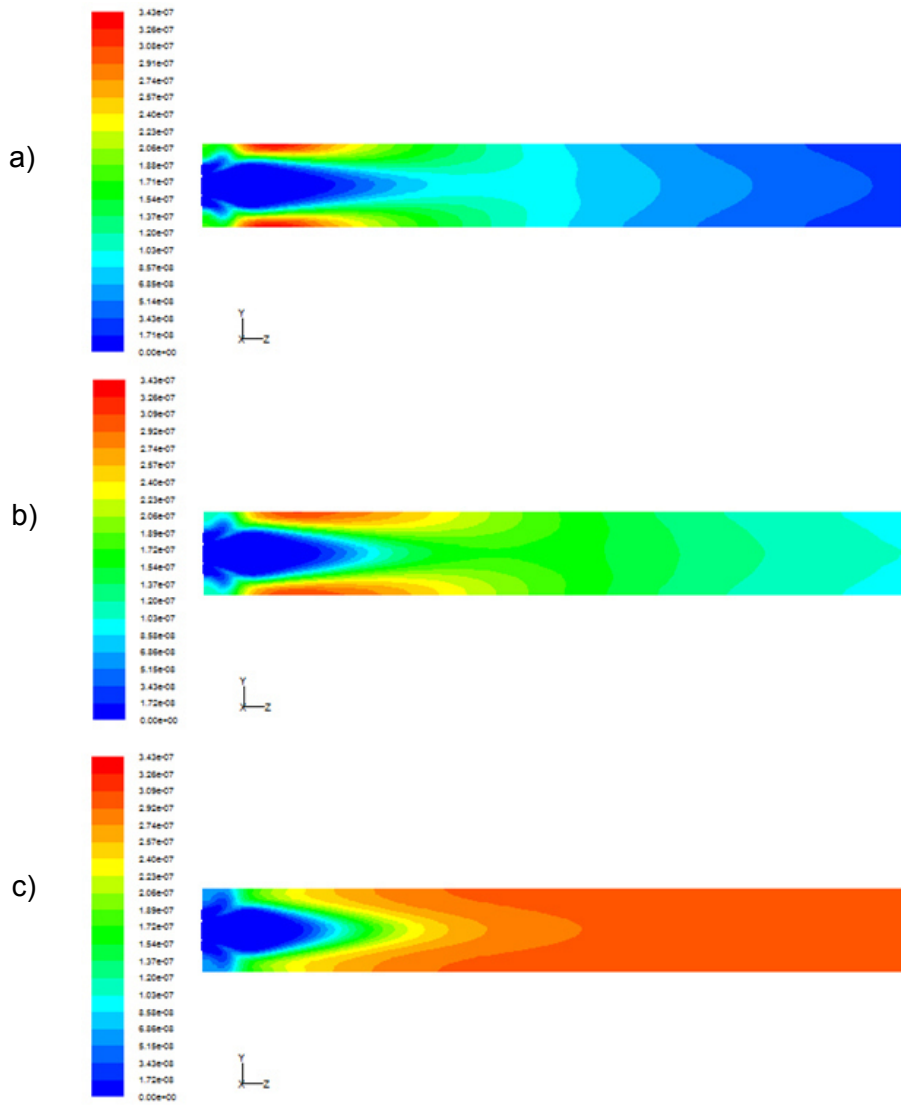


Figura 4.26 Contornos de Fracción másica de N_2O (Gráfica a) Dosado $\Phi=1.2$, Gráfica b) Dosado $\Phi=1$, Gráfica c) Dosado $\Phi=0.8$)

En la Figura 4.27 se muestran los perfiles de fracción másica de N_2O . Como se comentó anteriormente se sabe por los trabajos realizados por otros autores que al aumentar la concentración de O_2 en la mezcla las emisiones de CO_2 y sobre todo de NO_x aumentan [Merlo, 2014].

Observando las imágenes a, b, c y d de la Figura 4.27 se comprueba que para el dosado $\Phi=0.8$, en el cual la reducción de CH_4 aumenta el O_2 , al aumentar el O_2 se aumenta la formación de NO_x de tipo N_2O . Sin embargo, esto no ocurría así para el NO .

Tabla 4. 6 Partes por millón de N_2O

	$\Phi=0.8$	$\Phi=1$	$\Phi=1.2$
N_2O	0.301ppm	0.103ppm	0.0257ppm

Análisis Paramétrico

Como se observa en la Tabla 4.5 las emisiones de N_2O depende del dosado, aumentando con la disminución de éste. Aunque no se ha podido demostrar que las emisiones de NO_x son más sensibles al exceso de oxígeno a mayores niveles de O_2 como explica el siguiente autor [Wu, 2010].

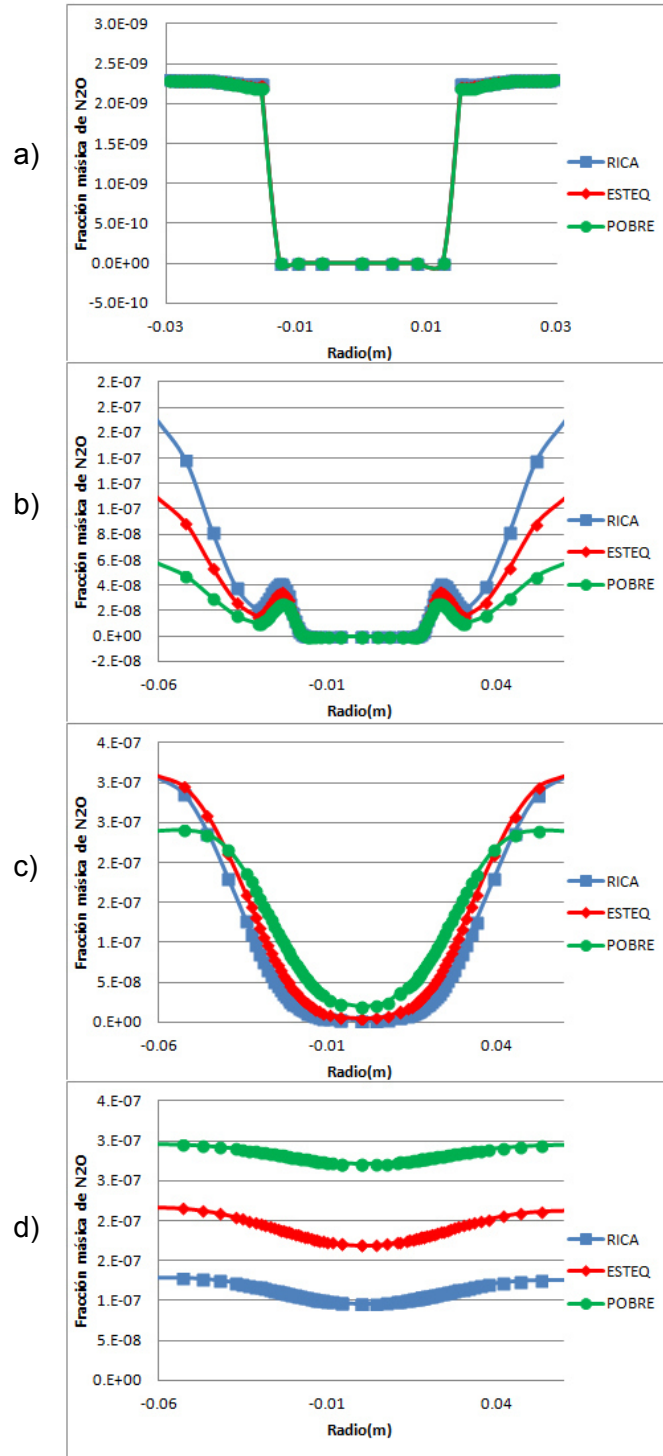


Figura 4. 27 Perfiles de Fracción másica de N_2O (Gráfica a) $l_z = -0.005m$, Gráfica b) $l_z = 0.025m$, Gráfica c) $l_z = 0.15m$, Gráfica d) $l_z = 0.4m$)



[CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS]

5.1. INTRODUCCIÓN

En el presente capítulo se recogerán todas las conclusiones obtenidas durante la realización de este TFG. Para continuar se propondrán una serie de trabajos futuros que ya sea por falta de tiempo o por salirse del ámbito que centra este TFG no se han tratado.

5.2. CONCLUSIONES GENERALES

Tras la realización de este TFG se ha llegado a una serie de conclusiones que son interesantes de remarcar. Se recuerda que el objetivo principal era la reducción de emisiones de gases contaminantes. Se han simulado 3 dosados: pobre, estequiométrico y rico en una llama con Swirl elevado.

Una ventaja importante de la llama $\Phi=0.8$ es que la temperatura máxima se concentra en la zona central de la cámara de combustión y no en las paredes como en los otros dos casos. Interesa que la temperatura en las paredes no aumente demasiado para no debilitar el material de la cámara de combustión y minimizar las labores de mantenimiento limpiando cenizas.

En cuanto a la velocidad, se concluye que el efecto del dosado sobre la velocidad tanto axial como tangencial es despreciable. No es un parámetro por tanto dependiente del dosado.

Se ha demostrado que al aumentar la concentración de O_2 en la mezcla, las emisiones de CO_2 y sobre todo de NO_x aumentan [Merlo, 2014]. No se ha podido asegurar que el CO_2 aumenta de manera lineal con el O_2 y que las emisiones de NO_x son más sensibles al exceso de oxígeno a mayores niveles de O_2 como propone [Wu, 2010]. Sería necesario alguna simulación más para llama pobre para comprobarlo.

Se ha comprobado que las emisiones de CO_2 disminuyen con el aumento del dosado.

Las inquemados de CH_4 se reducen con la reducción del dosado. Siendo las emisiones de esta especie las más bajas para el dosado de $\Phi=0.8$.

Se verifica que disminuyendo el dosado de CH_4 y por tanto aumentando la concentración de H_2 en la mezcla se reducen la formación de CO [Schefer, 2002]. Si cuantificamos las emisiones de esta especie para el dosado $\Phi=0.8$ se observa que las emisiones de CO son más bajas que para los otros dos casos.

Se llega a la conclusión de que la fracción másica de NO disminuye a medida que se aleja la concentración del dosado $\Phi=1$ y que es totalmente dependiente de la temperatura.

Una vez obtenidos los datos se demuestra que las emisiones de N_2O dependen al igual que las de NO de la temperatura. Como ocurría en la especie anterior las mayores concentraciones se dan en las paredes de la cámara de combustión. Es decir, las zonas de mayor temperatura. Por otro lado, las emisiones de N_2O depende del dosado, aumentando con la disminución de éste.

5.3. TRABAJOS FUTUROS

Entre los posibles trabajos a realizar para continuar esta línea de investigación se propone comprobar el efecto de la temperatura en la combustión en cuanto a las emisiones de gases contaminantes. Otros compañeros han hecho estudios sobre la influencia de la temperatura en la combustión para mejorar la eficiencia de dicha combustión [Escorial, 2015]. En este caso el interés se centraría en inquemados y las emisiones de CO , CO_2 y NOx .

Otro de los posibles caminos de investigación a seguir sería comprobar el efecto de un difusor a la entrada de la cámara de combustión. En este caso también otros compañeros probaron la modificación de la geometría de la cámara de combustión [Zamora, 2015]. Al igual que antes el interés se pondría sobre las emisiones.

Algunos autores concluyen en sus experimentos que el CO_2 aumenta de manera lineal con el O_2 y que las emisiones de NOx son más sensibles al exceso de oxígeno a mayores niveles de O_2 [Wu, 2010]. Se propone realizar simulaciones para llamas pobres.

Por otro lado otros autores proponen una modificación del comburente de la mezcla. Estos recomiendan aumentar la concentración de H_2 en el comburente de manera que el enriquecimiento de metano con hidrógeno aumenta la resistencia a la deformación de llama y reduce la concentración de CO sin afectar negativamente a las emisiones de NOx [Schefer, 2002]. En este TFG se ha reducido la concentración de CH_4 pero no aumentado la concentración de H_2 .

Los experimentos de ciertos autores muestran que a medida que el número de Swirl aumenta desde 0 a 1, la formación de NO térmico primero aumenta para valores bajos y luego disminuye a medida que se acerca a 1. Es decir el NO térmico es predominantemente afectado por la temperatura, mientras que el NO de combustible está predominantemente afectado por la mezcla de especies a través de la turbulencia. [Zhou, 2002]. El presente TFG utiliza un número de Swirl entorno a 0,9. Sería interesante comprobar cómo afectaría aumentar el número de Swirl como proponen estos autores.

Conclusiones y trabajos futuros

Por último resulta llamativa la propuesta realizada por una serie de autores. Estos sugieren introducir el CO_2 en la recirculación de los gases de escape a la cámara de combustión [Tan, 2002]. Se reducen de esta manera las emisiones de CO_2 y la reducción e incluso eliminación de las emisiones de NO_x . Además se consigue la mejora de la eficiencia de la planta debido al volumen de gas bajo y un mejor flexibilidad operativa.

Sería interesante para trabajos futuros ensayar dosados entre 0.8 y 1. Es posible que se alcancen temperaturas similares o incluso más altas que para el caso estequiométrico ahorrando combustible.

BIBLIOGRAFÍA

[BBC, 2013]

http://www.bbc.com/mundo/noticias/2013/10/131017_ciencia_especial_fracking_abc_am

(última visita, 30/11/16)

[BOE, 2007] Jefatura del Estado, *Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera*. Última modificación: 22 de septiembre de 2015. Referencia: BOE-A-2007-19744.

[BP, 2015]

http://www.bp.com/es_es/spain/prensa/notas-de-prensa/2015/bp-presenta-bp-statistical-review-2015.html

(última visita, 30/11/16)

[Crespo, 2006] A. Crespo, *Mecánica de Fluidos*, Editorial Paraninfo, 2006, ISBN: 8497322924.

[Escorial, 2015] A. G. Escorial, *Estudio de la combustión en CFD con variación de los modelos de combustión, dosado y temperatura*, TFG, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (Spain), 2015.

[Expansión, 2015]

<http://www.expansion.com/2015/02/05/empresas/energia/1423138068.html>

(última visita, 30/11/16)

[Fluent, 2009] *FLUENT 6.3 User's Guide*, ANSYS, Inc, 2009.

[Frassoldati, 2005] A. Frassoldati, S. Frigerio, E. Colombo, F. Inzoli y T. Favarelli, *Determination of NO_x emissions from strong swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure*, Chemical Engineering Science, Volume 60, Issue 11, June 2005, Pages 2851-2869, Milano (Italy), 2005.

[Hirsch,1994] Ch. Hirsch, *CFD methodology and validation for turbomachinery flows*, AGARD, Turbomachinery Design Using CFD 44 p (SEE N95-14127 03-34), Brussels (Belgium), 1994.

[Komarek, 2010] T. Komarek and W. Polifke, *Impact of Swirl Fluctuations on the Flame Response of a Perfectly Premixed Swirl Burner*, J. Eng. Gas Turbines Power 132(6), 061503 (Mar 18, 2010) (7 pages), Garching (Germany),2010.

[Mendoza, 2013] V. M. Mendoza, *Caracterización aerodinámica de un quemador con flujo rotante*, TFM, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (Spain), 2013.

[Merlo, 2014] N. Merlo, T. Boushaki, C. Chauveau, S. De Persis, L. Pillier, B. Sarh and I. Gökalp, *Combustion characteristics of methane–oxygen enhanced air turbulent non-premixed swirling flame*, Experimental Thermal and Fluid Science, Volume 56, July 2014, Pages 53-60, Orléans (France), 2014.

[Miltner,2015] M. Miltner, C. Jordan y M. Harasek, *CFD simulation of straight and slightly swirling turbulent free jets using different RANS-turbulence models*, Applied Thermal Engineering, Volume 89, 5 October 2015, Pages 1117-1126, Vienna (Austria), 2015.

[Pérez, 2013] J. R. Pérez, *Optimización del diseño de un generador de Swirl y caracterización aerodinámica del quemador de flujo rotante*, Proyecto fin de carrera, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (Spain), 2013.

[Pope, 2000] Stephen B. Pope, *Turbulent Flows*, Cornell University (New York), 2000. ISBN: 9780521598866.

[Roback,1983], R. Roback, & B. V. Johnson, *Mass and momentum turbulent transport experiments with confined swirling coaxial jets*. United Technologies Research Center, East Hartford, Connecticut (United States), 1983. NASA CR-168252.

[Schefer, 2002] R.W. Schefer, D.M. Wicksall and A.K. Agrawal, *Combustion of hydrogen-enriched methane in a lean premixed swirl-stabilized burner*, Proceedings of the Combustion Institute, Volume 29, Issue 1, 2002, Pages 843-851, Oklahoma (USA), 2002.

[SCIENCEDAILY, 2010]

<https://www.sciencedaily.com/releases/2010/04/100413122617.htm>

(última visita, 23/11/16)

[Tan, 2002] Y. Tan, M.A. Douglas, K. V. Thambimuthu, *CO₂ capture using oxygen enhanced combustion strategies for natural gas power plants*, Fuel, Volume 81, Issue 8, May 2002, Pages 1007–1016, Ontario (Canada), 2002.

[White, 2008]F. M. White, *Mecánica de Fluidos*, S.A. MCGRAW-HILL / INTERAMERICANA DE ESPAÑA, 2008. ISBN: 9788448166038.

[Wu, 2010] Kuo-Kuang Wu, Yu-Cheng Chang , Chiun-Hsun Chen y Young-Da Chen, *High-efficiency combustion of natural gas with 21–30% oxygen-enriched air*, Fuel, Volume 89, Issue 9, September 2010, Pages 2455–2462, Hsinchu (Taiwan),2010.

[Zamora, 2015] J.M. Zamora, Simulación CFD del proceso de combustión en un quemador con prerrotación, TFG, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (Spain), 2015.

[Zhou, 2002] L. X. Zhou, X. L. Chen and J. Zhang, *Studies on the effect of swirl on soot formation in methane/air turbulent combustion*, Proceedings of the Combustion Institute, Volume 29, Issue 2, 2002, Pages 2235-2242, Beijing (China), 2002.

ANEXOS

FLUENT

Version: 3d, pbns, pdf20, rngke (3d, pressure-based, 20 species pdf, RNG k-epsilon)

Release: 6.3.26

Title:

Models

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	RNG k-epsilon turbulence model
Wall Treatment	Non-Equilibrium Wall Functions
RNG Differential Viscosity Model	Disabled
RNG Swirl Dominated Flow Option	Enabled
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	None
Species Transport	PDF ((ch4 n2 o2 ch2o cho co co2 h h2 h2o hco o oh ho2 hono h2o2 hoco c2h6 hcooh o3) species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
Pollutants	Enabled
Pollutants	Disabled
Soot	Disabled

Boundary Conditions

Zones	name	id	type
fluid	2	fluid	
camaracomustion	3	fluid	
exteriorsalida	4	fluid	
exteriorentrada	5	fluid	
outerinlet1	10	wall	
outerinlet3	8	velocity-inlet	
innerinlet	7	velocity-inlet	
outerinlet2	9	wall	
outeroutlet	11	outflow	
default-interior	13	interior	
wall:001	1	wall	
wall:012	12	wall	
wall:014	14	wall	
default-interior:015	15	interior	
default-interior:016	16	interior	
default-interior:017	17	interior	
default-interior:018	18	interior	
default-interior:019	19	interior	
default-interior:020	20	interior	
default-interior:021	21	interior	

Boundary Conditions

Condition	Value	yes
Material Name	pdf-mixture	
Specify source terms?	no	
Source Terms	()	
Specify fixed values?	no	
Local Coordinate System for Fixed Velocities		no
Fixed Values	()	
Motion Type	0	
X-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Y-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Z-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Rotation speed (rad/s)	0	
X-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
X-Component of Rotation-Axis	0	

Y-Component of Rotation-Axis	0
Z-Component of Rotation-Axis	1
Deactivated Thread	no
Laminar zone?	no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	
Porous zone?	no
Conical porous zone?	no
X-Component of Direction-1 Vector	1
Y-Component of Direction-1 Vector	0
Z-Component of Direction-1 Vector	0
X-Component of Direction-2 Vector	0
Y-Component of Direction-2 Vector	1
Z-Component of Direction-2 Vector	0
X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	
Direction-1 Viscous Resistance (1/m2)	0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m2)	0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m2)	0
Choose alternative formulation for inertial resistance?	
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
C0 Coefficient for Power-Law	0
C1 Coefficient for Power-Law	0
Porosity	1
Solid Material Name	aluminum
camaracomustion	
Condition	Value
Material Name	pdf-mixture
Specify source terms?	no
Source Terms	()
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	
Fixed Values	()
Motion Type	0
X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Rotation speed (rad/s)	0
X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
X-Component of Rotation-Axis	0
Y-Component of Rotation-Axis	0
Z-Component of Rotation-Axis	1
Deactivated Thread	no
Laminar zone?	no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	
Porous zone?	no
Conical porous zone?	no
X-Component of Direction-1 Vector	1
Y-Component of Direction-1 Vector	0
Z-Component of Direction-1 Vector	0
X-Component of Direction-2 Vector	0
Y-Component of Direction-2 Vector	1
Z-Component of Direction-2 Vector	0
X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	

	Direction-1 Viscous Resistance (1/m ²)	0		Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
	Direction-2 Viscous Resistance (1/m ²)	0		Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
	Direction-3 Viscous Resistance (1/m ²)	0		Rotation speed (rad/s)	0
no	Choose alternative formulation for inertial resistance?			X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
	Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0		Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
	Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0		Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
	Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0		X-Component of Rotation-Axis	0
	C0 Coefficient for Power-Law	0		Y-Component of Rotation-Axis	0
	C1 Coefficient for Power-Law	0		Z-Component of Rotation-Axis	1
	Porosity	1		Deactivated Thread	no
	Solid Material Name	aluminum		Laminar zone?	no
exteriorsalida	Condition	Value	yes	Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	
	Material Name	pdf-mixture		Porous zone?	no
	Specify source terms?	no		Conical porous zone?	no
	Source Terms	()		X-Component of Direction-1 Vector	1
	Specify fixed values?	no		Y-Component of Direction-1 Vector	0
	Local Coordinate System for Fixed Velocities		no	Z-Component of Direction-1 Vector	0
	Fixed Values	()		X-Component of Direction-2 Vector	0
	Motion Type	0		Y-Component of Direction-2 Vector	1
	X-Velocity Of Zone (m/s)	0		Z-Component of Direction-2 Vector	0
	Y-Velocity Of Zone (m/s)	0		X-Component of Cone Axis Vector	1
	Z-Velocity Of Zone (m/s)	0		Y-Component of Cone Axis Vector	0
	Rotation speed (rad/s)	0		Z-Component of Cone Axis Vector	0
	X-Origin of Rotation-Axis (m)	0		X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
	Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0		Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
	Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0		Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
	X-Component of Rotation-Axis	0	yes	Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
	Y-Component of Rotation-Axis	0		Relative Velocity Resistance Formulation?	
	Z-Component of Rotation-Axis	1		Direction-1 Viscous Resistance (1/m ²)	0
	Deactivated Thread	no		Direction-2 Viscous Resistance (1/m ²)	0
	Laminar zone?	no		Direction-3 Viscous Resistance (1/m ²)	0
	Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?		no	Choose alternative formulation for inertial resistance?	
yes	Porous zone?	no		Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
	Conical porous zone?	no		Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
	X-Component of Direction-1 Vector	1		Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
	Y-Component of Direction-1 Vector	0		C0 Coefficient for Power-Law	0
	Z-Component of Direction-1 Vector	0		C1 Coefficient for Power-Law	0
	X-Component of Direction-2 Vector	0		Porosity	1
	Y-Component of Direction-2 Vector	1		Solid Material Name	aluminum
	Z-Component of Direction-2 Vector	0			
	X-Component of Cone Axis Vector	1	outerinlet1	Condition	Value
	Y-Component of Cone Axis Vector	0		Wall Thickness (m)	0
	Z-Component of Cone Axis Vector	0		Heat Generation Rate (w/m ³)	0
	X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1		Material Name	aluminum
	Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0		Thermal BC Type	1
	Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0		Temperature (k)	300
	Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0		Heat Flux (w/m ²)	0
yes	Relative Velocity Resistance Formulation?			Convective Heat Transfer Coefficient (w/m ² -k)	0
	Direction-1 Viscous Resistance (1/m ²)	0		Free Stream Temperature (k)	300
	Direction-2 Viscous Resistance (1/m ²)	0		Enable shell conduction?	no
	Direction-3 Viscous Resistance (1/m ²)	0		Wall Motion	0
no	Choose alternative formulation for inertial resistance?			Shear Boundary Condition	0
	Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0		Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
	Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0		Apply a rotational velocity to this wall?	no
	Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0		Velocity Magnitude (m/s)	0
	C0 Coefficient for Power-Law	0		X-Component of Wall Translation	1
	C1 Coefficient for Power-Law	0		Y-Component of Wall Translation	0
	Porosity	1		Z-Component of Wall Translation	0
	Solid Material Name	aluminum		Define wall velocity components?	no
exteriorentrada	Condition	Value		X-Component of Wall Translation (m/s)	0
	Material Name	pdf-mixture		Y-Component of Wall Translation (m/s)	0
	Specify source terms?	no		Z-Component of Wall Translation (m/s)	0
	Source Terms	()		External Emissivity	1
	Specify fixed values?	no		External Radiation Temperature (k)	300
	Local Coordinate System for Fixed Velocities		no	Wall Roughness Height (m)	0
	Fixed Values	()		Wall Roughness Constant	0.5
	Motion Type	0		Rotation Speed (rad/s)	0
	X-Velocity Of Zone (m/s)	0		X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
				Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
				Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
				X-Component of Rotation-Axis Direction	1

Y-Component of Rotation-Axis Direction	0	Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
Z-Component of Rotation-Axis Direction	0	X-component of shear stress (pascal)	0
X-component of shear stress (pascal)	0	Y-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0	Z-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0	Surface tension gradient (n/m-k)	0
Surface tension gradient (n/m-k)	0	Specularity Coefficient	0
Specularity Coefficient	0	ESTEQUIOMÉTRICA innerinlet	
outerinlet3		Condition	Value
Condition	Value	-----	-----
Velocity Specification Method	2	Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0	Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54	Velocity Magnitude (m/s)	0.66000003
Coordinate System	0	Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0	X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0	Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0	Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1	X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0	Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0	Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	0	X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0	Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0	Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	1	X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0	Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0	Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0	Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	1200	Temperature (k)	300
Turbulent Specification Method	3	Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1	Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1	Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	0.074999996	Turbulent Intensity (%)	0.12
Turbulent Length Scale (m)	1	Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.030999999	Hydraulic Diameter (m)	0.025
Turbulent Viscosity Ratio	10	Turbulent Viscosity Ratio	10
Pollutant NO Mass Fraction	0	Pollutant NO Mass Fraction	0
Pollutant HCN Mass Fraction	0	Pollutant HCN Mass Fraction	0
Pollutant NH3 Mass Fraction	0	Pollutant NH3 Mass Fraction	0
Pollutant N2O Mass Fraction	0	Pollutant N2O Mass Fraction	0
Mean Mixture Fraction	0	Mean Mixture Fraction	0.234
Mixture Fraction Variance	0	Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no	is zone used in mixing-plane model?	no
wall		RICA innerinlet	
Condition	Value	Condition	Value
-----	-----	-----	-----
Wall Thickness (m)	0	Velocity Specification Method	2
Heat Generation Rate (w/m3)	0	Reference Frame	0
Material Name	aluminum	Velocity Magnitude (m/s)	0.66000003
Thermal BC Type	1	Coordinate System	0
Temperature (k)	300	X-Velocity (m/s)	0
Heat Flux (w/m2)	0	Y-Velocity (m/s)	0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0	Z-Velocity (m/s)	0
Free Stream Temperature (k)	300	X-Component of Flow Direction	1
Enable shell conduction?	no	Y-Component of Flow Direction	0
Wall Motion	0	Z-Component of Flow Direction	0
Shear Boundary Condition	0	X-Component of Axis Direction	1
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes	Y-Component of Axis Direction	0
Apply a rotational velocity to this wall?	no	Z-Component of Axis Direction	0
Velocity Magnitude (m/s)	0	X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
X-Component of Wall Translation	1	Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Component of Wall Translation	0	Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Component of Wall Translation	0	Angular velocity (rad/s)	0
Define wall velocity components?	no	Temperature (k)	300
X-Component of Wall Translation (m/s)	0	Turbulent Specification Method	3
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0	Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0	Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
External Emissivity	1	Turbulent Intensity (%)	0.12
External Radiation Temperature (k)	300	Turbulent Length Scale (m)	1
Wall Roughness Height (m)	0	Hydraulic Diameter (m)	0.025
Wall Roughness Constant	0.5	Turbulent Viscosity Ratio	10
Rotation Speed (rad/s)	0	Mean Mixture Fraction	0.28099999
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	Mixture Fraction Variance	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	is zone used in mixing-plane model?	no
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	POBRE innerinlet	
X-Component of Rotation-Axis Direction	0	Condition	Value
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0	-----	-----
		Velocity Specification Method	2

Reference Frame	0	
Velocity Magnitude (m/s)	0.66000003	
Coordinate System	0	
X-Velocity (m/s)	0	
Y-Velocity (m/s)	0	
Z-Velocity (m/s)	0	
X-Component of Flow Direction	1	
Y-Component of Flow Direction	0	
Z-Component of Flow Direction	0	
X-Component of Axis Direction	1	
Y-Component of Axis Direction	0	
Z-Component of Axis Direction	0	
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0	
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0	
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0	
Angular velocity (rad/s)	0	
Temperature (k)	300	
Turbulent Specification Method	3	
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1	
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1	
Turbulent Intensity (%)	0.12	
Turbulent Length Scale (m)	1	
Hydraulic Diameter (m)	0.025	
Turbulent Viscosity Ratio	10	
Mean Mixture Fraction	0.18700001	
Mixture Fraction Variance	0	
is zone used in mixing-plane model?	no	
outerinlet2		
Condition	Value	

Wall Thickness (m)	0	
Heat Generation Rate (w/m3)	0	
Material Name	aluminum	
Thermal BC Type	1	
Temperature (k)	300	
Heat Flux (w/m2)	0	
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0	
Free Stream Temperature (k)	300	
Enable shell conduction?	no	
Wall Motion	0	
Shear Boundary Condition	0	
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes	
Apply a rotational velocity to this wall?	no	
Velocity Magnitude (m/s)	0	
X-Component of Wall Translation	1	
Y-Component of Wall Translation	0	
Z-Component of Wall Translation	0	
Define wall velocity components?	no	
X-Component of Wall Translation (m/s)	0	
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0	
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0	
External Emissivity	1	
External Radiation Temperature (k)	300	
Wall Roughness Height (m)	0	
Wall Roughness Constant	0.5	
Rotation Speed (rad/s)	0	
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
X-Component of Rotation-Axis Direction	0	
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0	
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1	
X-component of shear stress (pascal)	0	
Y-component of shear stress (pascal)	0	
Z-component of shear stress (pascal)	0	
Surface tension gradient (n/m-k)	0	
Specularity Coefficient	0	
wall:012		
Condition	Value	

Wall Thickness (m)	0	
Heat Generation Rate (w/m3)	0	
Material Name	aluminum	
Thermal BC Type	1	
Temperature (k)	300	
Heat Flux (w/m2)	0	
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0	
Free Stream Temperature (k)	300	
Enable shell conduction?	no	
Wall Motion	0	
Shear Boundary Condition	0	
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes	
Apply a rotational velocity to this wall?	no	
Velocity Magnitude (m/s)	0	
X-Component of Wall Translation	1	
Y-Component of Wall Translation	0	
Z-Component of Wall Translation	0	
Define wall velocity components?	no	
X-Component of Wall Translation (m/s)	0	
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0	
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0	
External Emissivity	1	
External Radiation Temperature (k)	300	
Wall Roughness Height (m)	0	
Wall Roughness Constant	0.5	
Rotation Speed (rad/s)	0	
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
X-Component of Rotation-Axis Direction	0	
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0	
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1	
X-component of shear stress (pascal)	0	
Y-component of shear stress (pascal)	0	
Z-component of shear stress (pascal)	0	
Surface tension gradient (n/m-k)	0	
Specularity Coefficient	0	
outeroutlet		
Condition	Value	

Flow rate weighting	1	
default-interior		
Condition	Value	

wall:001		
Condition	Value	

Wall Thickness (m)	0	
Heat Generation Rate (w/m3)	0	
Material Name	aluminum	
Thermal BC Type	1	
Temperature (k)	300	
Heat Flux (w/m2)	0	
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0	
Free Stream Temperature (k)	300	
Enable shell conduction?	no	
Wall Motion	0	
Shear Boundary Condition	0	
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes	
Apply a rotational velocity to this wall?	no	
Velocity Magnitude (m/s)	0	
X-Component of Wall Translation	1	
Y-Component of Wall Translation	0	
Z-Component of Wall Translation	0	
Define wall velocity components?	no	
X-Component of Wall Translation (m/s)	0	
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0	
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0	
External Emissivity	1	
External Radiation Temperature (k)	300	
Wall Roughness Height (m)	0	
Wall Roughness Constant	0.5	
Rotation Speed (rad/s)	0	
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0	
X-Component of Rotation-Axis Direction	0	
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0	
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1	
X-component of shear stress (pascal)	0	
Y-component of shear stress (pascal)	0	
Z-component of shear stress (pascal)	0	

```

Surface tension gradient (n/m-k)      0
Specularity Coefficient              0
wall:014
Condition                            Value
-----
Wall Thickness (m)                   0
Heat Generation Rate (w/m3)          0
Material Name                        aluminum
Thermal BC Type                      1
Temperature (k)                      300
Heat Flux (w/m2)                    0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)  0
Free Stream Temperature (k)          300
Enable shell conduction?             no
Wall Motion                          0
Shear Boundary Condition              0
Define wall motion relative to adjacent cell zone? yes
Apply a rotational velocity to this wall? no
Velocity Magnitude (m/s)             0
X-Component of Wall Translation       1
Y-Component of Wall Translation       0
Z-Component of Wall Translation       0
Define wall velocity components?     no
X-Component of Wall Translation (m/s) 0
Y-Component of Wall Translation (m/s) 0
Z-Component of Wall Translation (m/s) 0
External Emissivity                  1
External Radiation Temperature (k)   300
Wall Roughness Height (m)            0
Wall Roughness Constant              0.5
Rotation Speed (rad/s)               0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m) 0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m) 0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m) 0
X-Component of Rotation-Axis Direction 0
Y-Component of Rotation-Axis Direction 0
Z-Component of Rotation-Axis Direction 1
X-component of shear stress (pascal)  0
Y-component of shear stress (pascal)  0
Z-component of shear stress (pascal)  0
Surface tension gradient (n/m-k)     0
Specularity Coefficient              0
default-interior:015
Condition Value
-----
default-interior:016
Condition Value
-----
default-interior:017
Condition Value
-----
default-interior:018
Condition Value
-----
default-interior:019
Condition Value
-----
default-interior:020
Condition Value
-----
default-interior:021
Condition Value
-----
Solver Controls
-----
Equations
Equation    Solved
-----
Flow        no
Turbulence  no
Pollutant no yes
Pollutant hcn yes
Pollutant nh3 yes
Pollutant n2o yes
Energy      no
Pdf         no

```

```

Numerics
Numeric      Enabled
-----
Absolute Velocity Formulation yes
Relaxation
Variable      Relaxation Factor
-----
Pressure      0.30000001
Density       1
Body Forces   1
Momentum      0.69999999
Turbulent Kinetic Energy 0.80000001
Turbulent Dissipation Rate 0.80000001
Turbulent Viscosity 1
Pollutant no  0.89999998
Pollutant hcn 0.89999998
Pollutant nh3 0.89999998
Pollutant n2o 0.89999998
Energy        1
Temperature   1
Mean Mixture Fraction 1
Mixture Fraction Variance 0.89999998
Linear Solver
Solver        Termination Residual
Reduction
Variable      Type    Criterion  Tolerance
-----
Pressure      V-Cycle 0.1
X-Momentum    Flexible 0.1    0.7
Y-Momentum    Flexible 0.1    0.7
Z-Momentum    Flexible 0.1    0.7
Turbulent Kinetic Energy Flexible 0.1    0.7
Turbulent Dissipation Rate Flexible 0.1    0.7
Pollutant no  Flexible 0.1    0.7
Pollutant hcn Flexible 0.1    0.7
Pollutant nh3 Flexible 0.1    0.7
Pollutant n2o Flexible 0.1    0.7
Energy        Flexible 0.1    0.7
Mean Mixture Fraction Flexible 0.1    0.7
Mixture Fraction Variance Flexible 0.1    0.7
Pressure-Velocity Coupling
Parameter    Value
-----
Type        SIMPLE
Discretization Scheme
Variable      Scheme
-----
Pressure      Second Order
Momentum      Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate Second Order Upwind
Pollutant no  Second Order Upwind
Pollutant hcn Second Order Upwind
Pollutant nh3 Second Order Upwind
Pollutant n2o Second Order Upwind
Energy        Second Order Upwind
Mean Mixture Fraction Second Order Upwind
Mixture Fraction Variance Second Order Upwind
Solution Limits
Quantity      Limit
-----
Minimum Absolute Pressure 1
Maximum Absolute Pressure 5e+10
Minimum Temperature 1
Maximum Temperature 5000
Minimum Turb. Kinetic Energy 1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate 1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio 100000
Material Properties
-----
Material: o3 (fluid)
Property      Units  Method  Value(s)
-----
Density       kg/m3  pdf     #

```

Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000: 426.57767 1.6599477 -0.0012276859 2.3616526e-07 5.1440793e-11) (1000-5000: 940.48603 0.31532971 -0.000133478 2.5971038e-08 -1.8631106e-12)			Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454		Speed of Sound	m/s	none	#f	
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05		Material: h2o2 (fluid)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.9982		Property	Units	Method	Value(s)	
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1.426898e+08		Density	kg/m3	pdf	#f	
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	238850.58		Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000: 828.32602 1.6057414 -3.6298736e-05 -1.1307034e-06 6.0412174e-10) (1000-5000: 1117.8369 1.0598985 -0.0003604639 5.7415146e-08 -3.4994464e-12)		
Reference Temperature	k	constant	298.15		Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454	
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0		Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05	
Speed of Sound	m/s	none	#f		Molecular Weight	kg/kgmol	constant	34.01468	
Material: hcooh (fluid)					Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.3610648e+08	
Property	Units	Method	Value(s)		Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	232877.52	
Density	kg/m3	pdf	#f		Reference Temperature	k	constant	298.15	
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1500: 168.47072 3.4160115 -0.0028089748 1.3169124e-06 -2.6802301e-10) (1500-4000: 1437.8848 0.54636862 -6.2038096e-05 -2.3967481e-08 4.5527045e-12)			Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454		Speed of Sound	m/s	none	#f	
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05		Material: hono (fluid)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	46.02568		Property	Units	Method	Value(s)	
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.8749678e+08		Density	kg/m3	pdf	#f	
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	248004.19		Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000: 405.06018 2.4934515 -0.0024190849 1.3261613e-06 -3.3193117e-10) (1000-5000: 970.35838 0.7459658 -0.00029165133 5.255771e-08 -3.5744059e-12)		
Reference Temperature	k	constant	298.15		Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454	
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0		Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05	
Speed of Sound	m/s	none	#f		Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.01344	
Material: c2h6 (fluid)					Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-76735619	
Property	Units	Method	Value(s)		Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	249337.65	
Density	kg/m3	pdf	#f		Reference Temperature	k	constant	298.15	
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000: 404.39609 4.284319 0.0015983264 -3.4779406e-06 1.2681157e-09) (1000-4000: 1334.3854 3.8269175 -0.0012600946 1.8594723e-07 -9.9490163e-12)			Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454		Speed of Sound	m/s	none	#f	
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05		Material: ho2 (fluid)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.06964		Property	Units	Method	Value(s)	
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-83858870		Density	kg/m3	pdf	#f	
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228975.66		Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000: 750.64746 1.2586592 -0.0009549455 5.9301684e-07 -2.037611e-10) (1000-5000: 1025.7778 0.53686973 -0.00013371124 1.5396699e-08 -7.1568424e-13)		
Reference Temperature	k	constant	298.15		Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454	
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0		Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05	
Speed of Sound	m/s	none	#f		Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674	
Material: hoco (fluid)					Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847	
Property	Units	Method	Value(s)		Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05	
Density	kg/m3	pdf	#f		Reference Temperature	k	constant	298.15	
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1500: 422.03987 2.4959696 -0.0021431596 9.3213399e-07 -1.6681655e-10) (1500-4000: 1388.4341 0.23253041 -3.529247e-05 -5.79261e-09 1.393982e-12)			Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454		Speed of Sound	m/s	none	#f	
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05		Material: oh (fluid)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	45.01774		Property	Units	Method	Value(s)	
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.9368383e+08		Density	kg/m3	pdf	#f	
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	251548.57		Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000: 1778.142 0.09048502 -0.00081942281 1.1670261e-06 -4.1218601e-10) (1000-5000: 1409.2737 0.49569933 -0.00011130917 1.0631324e-08 -2.5060852e-13)		
Reference Temperature	k	constant	298.15		Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454	

Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant					
17.00734							
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		Density	kg/m3	pdf	#
38985683				Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		1000: 13602.855 3.4024177 -0.0033585231 -3.9080689e-07			
183602.61				1.7053957e-09) (1000-5000: 12337.891 2.8873611 -			
Reference Temperature	k	constant	298.15	0.00023236285 -3.8074924e-08 6.5279369e-12)			
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Speed of Sound	m/s	none	#	Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Material: o (fluid)				Molecular Weight	kg/kgmol	constant	
Property	Units	Method	Value(s)	2.01588			
				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	
				2448.5948			
				Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
				130593.59			
Density	kg/m3	pdf	#	Reference Temperature	k	constant	298.15
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-	Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
1000: 1531.1577 -0.851299 0.0012581269 -8.3294264e-07				Speed of Sound	m/s	none	#
2.0218614e-10) (1000-5000: 1321.021 -0.014317108 -				Material: h (fluid)			
1.6124204e-06 2.3650336e-09 -2.2699264e-13)				Property	Units	Method	Value(s)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454				
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant					
15.9994				Density	kg/m3	pdf	#
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-
2.49195e+08				1000: 20622.11 0 0 0 0) (1000-5000: 20622.11 0 0 0 0)			
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
160943.58				Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Reference Temperature	k	constant	298.15	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	1.00794			
Speed of Sound	m/s	none	#	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	
Material: hco (fluid)				2.1797701e+08			
Property	Units	Method	Value(s)	Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
				114603.82			
				Reference Temperature	k	constant	298.15
				Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
				Speed of Sound	m/s	none	#
				Material: co2 (fluid)			
				Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-				
1000: 830.42975 1.7761804 -0.0027572078 3.1225683e-06 -							
1.3107969e-09) (1000-5000: 1019.2299 0.95857389 -							
0.00038250616 7.0786873e-08 -4.9105261e-12)							
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454				
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant					
29.01834				Density	kg/m3	pdf	#
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-
43516831				1000: 429.93022 1.8744798 -0.0019664917 1.2972557e-06 -			
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		3.9999695e-10) (1000-5000: 841.37933 0.59324115 -			
224528.15				0.00024151756 4.5227419e-08 -3.153141e-12)			
Reference Temperature	k	constant	298.15	Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Speed of Sound	m/s	none	#	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	
Material: h2o (fluid)				44.0098			
Property	Units	Method	Value(s)	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
				3.9354283e+08			
				Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
				213734.59			
				Reference Temperature	k	constant	298.15
				Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
				Speed of Sound	m/s	none	#
				Material: co (fluid)			
				Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-				
1000: 1563.0818 1.6037598 -0.0029327939 3.2161116e-06 -							
1.1568305e-09) (1000-5000: 1233.2377 1.4105281 -							
0.00040291547 5.5427906e-08 -2.949834e-12)							
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454				
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant					
18.01528				Density	kg/m3	pdf	#
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-
2.4184276e+08				1000: 968.39484 0.44879012 -0.0011522231 1.656891e-06 -			
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		7.3464085e-10) (1000-5000: 897.9353 0.4282339 -			
188713.27				0.0001671401 3.0234596e-08 -2.0513808e-12)			
Reference Temperature	k	constant	298.15	Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Speed of Sound	m/s	none	#	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	
Material: h2 (fluid)				28.0104			
Property	Units	Method	Value(s)	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
				1.1053974e+08			
				Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
				197546.27			

Reference Temperature	k	constant	298.15	Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Speed of Sound	m/s	none	#	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	
Material: cho (fluid)				28.0134			
Property	Units	Method	Value(s)	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	
				1429.881			
				Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
				191509.42			
Density	kg/m3	pdf	#	Reference Temperature	k	constant	298.15
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 830.42975 1.7761804 -0.0027572078 3.1225683e-06 -1.3107969e-09) (1000-5000: 1019.2299 0.95857389 -0.00038250616 7.0786873e-08 -4.9105261e-12)	Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
				Speed of Sound	m/s	none	#
				Material: ch4 (fluid)			
				Property	Units	Method	Value(s)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454				
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant					
29.01834							
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		Density	kg/m3	pdf	#
43516831				Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5915 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000: 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant					
224528.15				Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Reference Temperature	k	constant	298.15	Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	
Speed of Sound	m/s	none	#	16.04276			
Material: ch2o (fluid)				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
Property	Units	Method	Value(s)	74892973			
				Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
				186057.77			
				Reference Temperature	k	constant	298.15
Density	kg/m3	pdf	#	Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 457.64471 3.497672 -0.0052283769 5.6765789e-06 -2.329643e-09) (1000-5000: 829.48959 1.8500718 -0.00072796288 1.3117276e-07 -8.895527e-12)	Speed of Sound	m/s	none	#
				Material: (ch2o . pdf-mixture) (fluid)			
				Property	Units	Method	Value(s)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454				
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant					
30.02628				Density	kg/m3	pdf	#
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 457.64471 3.497672 -0.0052283769 5.6765789e-06 -2.329643e-09) (1000-5000: 829.48959 1.8500718 -0.00072796288 1.3117276e-07 -8.895527e-12)
1.1591431e+08							
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.02628
218606.78				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
Reference Temperature	k	constant	298.15	1.1591431e+08			
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	
Speed of Sound	m/s	none	#	218606.78			
Material: o2 (fluid)				Reference Temperature	k	constant	298.15
Property	Units	Method	Value(s)	Speed of Sound	m/s	none	#
				Material: pdf-mixture (mixture)			
				Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82638 0.29295803 -0.0001495637 3.4138851e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.7523 0.15941258 -3.2708853e-05 4.6127636e-09 -2.9528327e-13)	Mixture Species	names	(ch4 n2 o2 ch2o cho co co2 h h2 h2o hco o oh ho2 hono h2o2 hoco c2h6 hcooh o3)	
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454	Density	kg/m3	pdf	#
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#
Molecular Weight	kg/kgmol	constant		Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
31.9988				Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-	Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
847.64045				Speed of Sound	m/s	none	#
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		Material: (hcooh . pdf-mixture) (fluid)			
205041.62				Property	Units	Method	Value(s)
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material: n2 (fluid)							
Property	Units	Method	Value(s)				
				Density	kg/m3	pdf	#
				Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: 168.47072 3.4160115 -0.0028089748 1.3169124e-06 -2.6802301e-10) (1500-4000: 1437.8848 0.54636862 -6.2038096e-05 -2.3967481e-08 4.5527045e-12)
				Molecular Weight	kg/kgmol	constant	46.02568
				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
				3.8749678e+08			

Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	248004.19				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(o3 . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 828.32602 1.6057414 -3.6298736e-05 -1.1307034e-06 -6.0412174e-10) (1000-5000: 1.117.8369 1.0598985 -0.0003604639 5.7415146e-08 -3.4994464e-12)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	34.01468				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	238850.58				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(c2h6 . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 426.57767 1.6599477 -0.0012276859 2.3616526e-07 5.1440793e-11) (1000-5000: 940.48603 0.31532971 -0.000133478 2.5971038e-08 -1.8631106e-12)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.9982				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1.426898e+08				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	238850.58				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(c2h6 . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 404.39609 4.284319 0.0015983264 -3.4779406e-06 1.2681157e-09) (1000-4000: 1334.3854 3.8269175 -0.0012600946 1.8594723e-07 -9.9490163e-12)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.06964				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228975.66				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(hoco . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: 422.03987 2.4959696 -0.0021431596 9.3213399e-07 -1.6681655e-10) (1500-4000: 1388.4341 0.23253041 -3.529247e-05 -5.79261e-09 1.393982e-12)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	45.01774				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	251548.57				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(hono . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 405.06018 2.4934515 -0.0024190849 1.3261613e-06 -3.3193117e-10) (1000-5000: 970.35838 0.7459658 -0.00029165133 5.255771e-08 -3.5744059e-12)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.01344				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	249337.65				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(h2o2 . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1778.142 0.09048502 -0.00081942281 1.1670261e-06 -4.1218601e-10) (1000-5000: 1409.2737 0.49569933 -0.00011130917 1.0631324e-08 -2.5060852e-13)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(oh . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 750.64746 1.2586592 -0.0009549455 5.9301684e-07 -2.037611e-10) (1000-5000: 1025.7778 0.53686973 -0.00013371124 1.5396699e-08 -7.1568424e-13)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(oh . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				
Density	kg/m3	pdf	#				
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1778.142 0.09048502 -0.00081942281 1.1670261e-06 -4.1218601e-10) (1000-5000: 1409.2737 0.49569933 -0.00011130917 1.0631324e-08 -2.5060852e-13)				
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674				
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05				
Reference Temperature	k	constant	298.15				
Speed of Sound	m/s	none	#				
Material:	(h2o2 . pdf-mixture) (fluid)						
Property	Units	Method	Value(s)				

Molecular Weight	kg/kgmol	constant	17.00734	-----
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		-----
38985683				
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		Density
183602.61				kg/m3
Reference Temperature	k	constant	298.15	pdf
Speed of Sound	m/s	none	#	#
Material: (o . pdf-mixture) (fluid)				Cp (Specific Heat)
Property	Units	Method	Value(s)	j/kg-k
-----				polynomial (300-1000:
				968.39484 0.44879012 -0.0011522231 1.656891e-06 -
				7.3464085e-10) (1000-5000: 897.9353 0.4282339 -
				0.0001671401 3.0234596e-08 -2.0513808e-12)
				Molecular Weight
				kg/kgmol
				constant
				28.0104
				Standard State Enthalpy
				j/kgmol
				constant
				-
				1.1053974e+08
				Standard State Entropy
				j/kgmol-k
				constant
				197546.27
Density	kg/m3	pdf	#	Reference Temperature
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000:		k
1531.1577 -0.851299 0.0012581269 -8.3294264e-07				constant
2.0218614e-10) (1000-5000: 1321.021 -0.014317108 -				298.15
1.6124204e-06 2.3650336e-09 -2.2699264e-13)				Speed of Sound
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	15.9994	m/s
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		none
2.49195e+08				#
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		Material: (h2o . pdf-mixture) (fluid)
160943.58				Property
Reference Temperature	k	constant	298.15	Units
Speed of Sound	m/s	none	#	Method
Material: (h . pdf-mixture) (fluid)				Value(s)
Property	Units	Method	Value(s)	-----

Density	kg/m3	pdf	#	Density
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000:		kg/m3
20622.11 0 0 0 0) (1000-5000: 20622.11 0 0 0 0)				pdf
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	1.00794	#
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		Cp (Specific Heat)
2.1797701e+08				j/kg-k
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		polynomial (300-1000:
114603.82				1563.0818 1.6037598 -0.0029327939 3.2161116e-06 -
Reference Temperature	k	constant	298.15	2.2783585e-10) (1000-5000: 1233.2377 1.4105281 -
Speed of Sound	m/s	none	#	0.00040291547 5.5427906e-08 -2.949834e-12)
Material: (co2 . pdf-mixture) (fluid)				Molecular Weight
Property	Units	Method	Value(s)	kg/kgmol
-----				constant
				18.01528
				Standard State Enthalpy
				j/kgmol
				constant
				-
				2.4184276e+08
				Standard State Entropy
				j/kgmol-k
				constant
				188713.27
Density	kg/m3	pdf	#	Reference Temperature
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000:		k
20622.11 0 0 0 0) (1000-5000: 20622.11 0 0 0 0)				constant
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	1.00794	298.15
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		Speed of Sound
2.1797701e+08				m/s
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		none
114603.82				#
Reference Temperature	k	constant	298.15	Material: (o2 . pdf-mixture) (fluid)
Speed of Sound	m/s	none	#	Property
Material: (co2 . pdf-mixture) (fluid)				Units
Property	Units	Method	Value(s)	Method
-----				Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#	Density
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000:		kg/m3
429.93022 1.8744798 -0.0019664917 1.2972557e-06 -				pdf
3.9999695e-10) (1000-5000: 841.37933 0.59324115 -				#
0.00024151756 4.5227419e-08 -3.153141e-12)				Cp (Specific Heat)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.0098	j/kg-k
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		polynomial (300-1000:
3.9354283e+08				834.82638 0.29295803 -0.0001495637 3.4138851e-07 -
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		2.2783585e-10) (1000-5000: 960.7523 0.15941258 -
213734.59				3.2708853e-05 4.6127636e-09 -2.9528327e-13)
Reference Temperature	k	constant	298.15	Molecular Weight
Speed of Sound	m/s	none	#	kg/kgmol
Material: (h2 . pdf-mixture) (fluid)				constant
Property	Units	Method	Value(s)	31.9988
-----				Standard State Enthalpy
				j/kgmol
				constant
				-
				847.64045
				Standard State Entropy
				j/kgmol-k
				constant
				205041.62
Density	kg/m3	pdf	#	Reference Temperature
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (300-1000:		k
13602.855 3.4024177 -0.0033585231 -3.9080689e-07				constant
1.7053957e-09) (1000-5000: 12337.891 2.8873611 -				298.15
0.00023236285 -3.8074924e-08 6.5279369e-12)				Speed of Sound
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01588	m/s
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		none
2448.5948				#
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		Material: (jet-a<g> . pdf-mixture) (fluid)
130593.59				Property
Reference Temperature	k	constant	298.15	Units
Speed of Sound	m/s	none	#	Method
Material: (co . pdf-mixture) (fluid)				Value(s)
Property	Units	Method	Value(s)	-----

Density	kg/m3	pdf	#	Density
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial (273.15-		kg/m3
13602.855 3.4024177 -0.0033585231 -3.9080689e-07				pdf
1.7053957e-09) (1000-5000: 12337.891 2.8873611 -				#
0.00023236285 -3.8074924e-08 6.5279369e-12)				Cp (Specific Heat)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01588	j/kg-k
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant		polynomial (273.15-
2448.5948				1000: 103.70508 6.6165853 -0.0040329449 1.4614312e-06 -
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant		3.2397358e-10) (1000-5000: 1236.368 3.8884678 -
130593.59				0.0015678577 2.8761674e-07 -1.9791652e-11)
Reference Temperature	k	constant	298.15	Molecular Weight
Speed of Sound	m/s	none	#	kg/kgmol
Material: (co . pdf-mixture) (fluid)				constant
Property	Units	Method	Value(s)	167.31462

Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.01055
2.4971701e+08				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	628431.5	1.1053956e+08			
Reference Temperature	k	constant	298.15	Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197531.64
Speed of Sound	m/s	none	#	Reference Temperature	k	constant	298.15
Material: (ch4 . pdf-mixture) (fluid)				Speed of Sound	m/s	none	#
Property	Units	Method	Value(s)	Material: (carbon-dioxide . methane-air-2step) (fluid)			
-----				Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#	Density	kg/m3	constant	1.7878
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:
403.5915 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -				429.92889 1.874473 -0.0019664851 1.2972509e-06 -			
6.3431579e-09) (1000-5000: 872.48132 5.3055622 -				3.9999559e-10) (1000-5000: 841.37646 0.59323931 -			
0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)				0.00024151675 4.5227278e-08 -3.1531301e-12)			
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04276	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.009949
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-
74892973				3.9353235e+08			
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186057.77	Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2
Reference Temperature	k	constant	298.15	Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#	Speed of Sound	m/s	none	#
Material: methane-air-2step (mixture)				Material: (oxygen . methane-air-2step) (fluid)			
Property	Units	Method	Value(s)	Property	Units	Method	Value(s)
-----				-----			
Mixture Species		names	(ch4 o2 co2				
co h2o n2)							
Density	kg/m3	pdf	#	Density	kg/m3	constant	1.2999
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454	834.82648 0.29295799 -0.0001495637 3.413885e-07 -			
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05	2.2783581e-10) (1000-5000: 960.75232 0.15941258 -			
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0	3.2708853e-05 4.6127648e-09 -2.9528325e-13)			
Speed of Sound	m/s	none	#	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Material: (nitrogen . methane-air-2step) (fluid)				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Property	Units	Method	Value(s)	Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205026.86
-----				Reference Temperature	k	constant	298.15
				Speed of Sound	m/s	none	#
Density	kg/m3	constant	1.138	Material: (methane . methane-air-2step) (fluid)			
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:	Property	Units	Method	Value(s)
979.04303 0.41796389 -0.001176279 1.674394e-06 -				-----			
7.2562972e-10) (1000-5000: 868.62292 0.44162953 -				Density	kg/m3	constant	0.6679
0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)				Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	2222
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.013399	Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.78	Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.15	Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#	Speed of Sound	m/s	none	#
Material: (water-vapor . methane-air-2step) (fluid)				Material: mixture-template (mixture)			
Property	Units	Method	Value(s)	Property	Units	Method	Value(s)
-----				-----			
				Mixture Species		names	(h2o o2 n2)
Density	kg/m3	constant	0.5542	Density	kg/m3	pdf	#
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#
1563.077 1.603755 -0.0029327839 3.216101e-06 -				Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
1.156827e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 -				Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
0.0004029141 5.5427719e-08 -2.949824e-12)				Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.015341	Speed of Sound	m/s	none	#
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-	Material: (nitrogen . mixture-template) (fluid)			
2.418379e+08				Property	Units	Method	Value(s)
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188696.44	-----			
Reference Temperature	k	constant	298.15	Density	kg/m3	constant	1.138
Speed of Sound	m/s	none	#	Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1040.67
Material: (carbon-monoxide . methane-air-2step) (fluid)				Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
Property	Units	Method	Value(s)	Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
-----				Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.78
				Reference Temperature	k	constant	298.15
Density	kg/m3	constant	1.1233	Speed of Sound	m/s	none	#
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:	Material: (oxygen . mixture-template) (fluid)			
968.38977 0.44878769 -0.001152217 1.656882e-06 -				Property	Units	Method	Value(s)
7.3463702e-10) (1000-5000: 897.93054 0.4282316 -				-----			
0.00016713922 3.0234435e-08 -2.0513699e-12)				Density	kg/m3	constant	1.2999
				Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	919.31
				Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
				Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0

Standard State Entropy j/kgmol-k constant 205026.86
 Reference Temperature k constant 298.15
 Speed of Sound m/s none #f

Material: (water-vapor . mixture-template) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	constant	0.5542
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	2014
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01534
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-

2.418379e+08			
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188696.44
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: aluminum (solid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	constant	2719
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	871
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	202.4

Density	kg/m3	constant	2719
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	871
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	202.4

Density	kg/m3	constant	2719
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	871
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	202.4