



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

GRADO EN INGENIERÍA MECÁNICA

**ESTUDIO DE LA COMBUSTIÓN EN UN
QUEMADOR DE FLUJO ROTANTE
VARIANDO LA ESTEQUIOMETRIA,
DOSADO Y MODELO DE COMBUSTIÓN**

Autor:

Pastor Alonso, David

Tutor:

Parra Santos, María Teresa

Dpto. Ingeniería Energética y

Fluidomécánica

Valladolid, Junio, 2017

Me gustaría dedicar este trabajo a mis padres por el apoyo que me brindaron día a día en el transcurso de mi carrera universitaria y a mi tutora por impartirme los conocimientos necesarios para llevarlo a cabo.

Muchas gracias.

Acrónimos

CFD (Computational Fluid Dynamics)

ED (Eddy-Disipation)

EDC (Eddy-Dissipation-Concept)

DEM (Discrete Element Method)

DNS (Direct Numerical Simulation)

IRZ (Inner Recirculation Zone) zona de rotación interior

LES (Large Eddy Simulation)

ORZ (Outter Recirculation Zone) zona de recirculación exterior

PDF (Probability Density Function) Función Densidad de Probabilidad

RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)

ÍNDICE

1	CAPÍTULO	7
	INTRODUCCIÓN	7
1.1	PRESENTACIÓN	9
1.2	JUSTIFICACIÓN	9
1.3	OBJETIVOS	11
1.4	ANTECEDENTES	11
1.4.1	ANTECEDENTES DENTRO DEL EQUIPO DE TRABAJO	11
1.5	ESTRUCTURA DE LA MEMORIA	12
2	CAPÍTULO	13
2.1	PRESENTACIÓN	15
2.2	MODELO FÍSICO	15
2.2.1	NÚMERO DE SWIRL	16
2.3	MODELO NUMÉRICO	17
2.3.1	INTRODUCCIÓN	17
2.3.2	SOFTWARE Y HARDWARE	17
2.3.3	RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE LAS ECUACIONES DE LA MECÁNICA DE FLUIDOS	17
2.3.4	MODELO DE TURBULENCIA	19
2.3.4.1	DNS (Direct Numerical Simulation)	20
2.3.4.1.1	Ecuaciones de Navier-Stokes	20
2.3.4.2	LES (Large Eddy Simulation)	20
2.3.4.3	RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)	21
2.3.5	MODELO DE COMBUSTIÓN	23
2.3.5.1	PDF (Probability Density Function)	23
2.3.5.2	ED (Eddy-Dissipation)	25
2.3.5.3	EDC (Eddy Dissipation Concept)	26
2.4	ESTADO DEL ARTE	26
2.4.1	INVESTIGACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO GAS-PARTÍCULA EN UN QUEMADOR DE TIPO SWIRL CON BAJAS EMISIONES DE NO _x – METODO DEM-CFD	26
2.4.2	CARACTERIZACIÓN TÉRMICA DE LA COMBUSTIÓN DE CARBÓN/PAJA BAJO DIFERENTES CONDICIONES DE OXIGENACIÓN EN UN QUEMADOR DE TIPO SWIRL	29
2.4.3	RESPUESTA DE LA TEMPERATURA DE LA SUPERFICIE DEL QUEMADOR EN FUNCIÓN DE LAS TRANSICIONES DE UNA LLAMA TURBULENTA Y BIESTABLE	32
2.4.4	ESTUDIO DE LAS EMISIONES CONTAMINANTES Y DINÁMICA DE LLAMAS NO PREMEZCLADAS Y TURBULENTAS EN UN QUEMADOR DE SWIRL	34
2.4.5	INVESTIGACIÓN NUMÉRICA DE LLAMAS CON SWIRL Y TURBULENTAS CON VALIDACIÓN DEL MODELO DE TURBINA DE GAS	38
2.5	CONCLUSIONES	41

3	CAPÍTULO	43
3.1	PRESENTACIÓN	45
3.2	PATRONES DE FLUJO EN MEZCLA Y COMBUSTIÓN	49
3.2.1	CASOS DE MEZCLA	49
3.2.2	CASOS CON REACCIÓN EDC	52
3.2.2.1	Influencia del factor de Swirl	52
4	CAPÍTULO	57
4.1	PRESENTACIÓN	59
4.2	EDC (EDDY-DISSIPATION-CONCEPT)	60
4.3	PDF (PROBABILITY DENSITY FUNCTION)	65
4.3.1	ESTUDIO CINEMÁTICO DEL FLUJO (CASOS 7 Y 8)	65
4.3.2	ANÁLISIS DE TEMPERATURAS Y DE FRACCIONES MÁSCAS	76
4.4	ED (EDDY DISSIPATION)	78
4.5	ANÁLISIS DE LA MEZCLA	80
4.6	COMPARACIÓN DE LOS MODELOS DE COMBUSTIÓN	83
4.7	CONCLUSIONES SOBRE EL ADITIVO	88
5	CAPÍTULO	91
5.1	PRESENTACIÓN	93
5.2	INFLUENCIA del dosado en modelos EDC	95
5.3	CONCLUSIONES	101
6	CAPÍTULO	103
6.1	INTRODUCCIÓN	105
6.2	CONCLUSIONES	105
6.3	TRABAJOS FUTUROS	106
	REFERENCIAS	109
	ANEXO	115

1 CAPÍTULO

INTRODUCCIÓN

1.1 PRESENTACIÓN

En este capítulo se presentan los objetivos, futuras aplicaciones y justificación de este Trabajo de Fin de Grado. También se pretende que el primer capítulo sirva de hilo introductor y sentar las bases en las que se entrará más a fondo posteriormente en la memoria.

Con este trabajo se estudia la combustión de metano (CH_4) en un quemador coaxial con flujo rotante como el planteado por el informe de Roback y Johnson [Roback, 1983]. Este estudio se realizará por medio de la simulación numérica CFD, con el software Fluent 6.3.

Un quemador es una máquina térmica cuya función se basa en transformar la energía química retenida en los enlaces moleculares del combustible en energía térmica por medio del proceso químico de combustión. Esta transformación de energía se manifestará en un gran aumento de temperatura de la mezcla saliente del quemador respecto de la mezcla entrante.

Se pueden utilizar numerosos tipos de combustibles en quemadores industriales, en este caso se utilizará combustible gaseoso. Si se utilizasen combustibles líquidos sería necesario hacer uso de modelos de evaporación y rotura de chorro de gotas. El principal combustible a utilizar será gas natural ya que es la principal fuente de metano. Estos resultados se compararán con otros combustibles fáciles de estudiar como el hidrógeno u otros combustibles de metano con otra estequiometría.

1.2 JUSTIFICACIÓN

A la hora de estudiar la producción de energía es importante tener en cuenta las restricciones de emisiones de gases contaminantes que hay tanto a nivel nacional como a nivel europeo. Estas restricciones han surgido en parte por el incremento de temperatura que ha sufrido el planeta en los últimos años. La temperatura global del planeta ha aumentado $1.0\text{ }^\circ\text{C}$ en los últimos 130 años [Oh, 2013]. Por ello es importante optimizar el proceso de combustión y, además tener en cuenta otros parámetros menos intuitivos como el tiempo de residencia del combustible en la cámara, el cual es el principal parámetro que influye en la producción de emisiones NO_x [Pérez, 2016].

Como se ha mencionado previamente, el combustible a utilizar será el gas natural que será inyectado en la cámara de combustión como una mezcla de gas natural con un aditivo que irá variando según el experimento.

Aunque la producción de energía a partir de fuentes de energía renovable está en auge debido a la menor cantidad de emisiones contaminantes que éstas producen el 85,9% de la producción energética mundial de 2015 proviene de combustibles fósiles [BP, 2016].

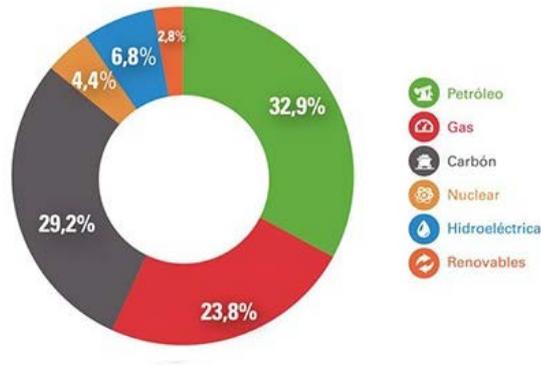


Figura 1. 1 Consumo de energía mundial en 2015 [BP, 2017]

En la fig.1.1 se puede observar que el 23,8% del mix energético mundial proviene de la combustión de gas natural, así que se puede afirmar que es una de las principales fuentes de energía, de manera que una optimización en la manera de quemar gas natural supondría una gran mejoría de las emisiones contaminantes en el mundo.

Cabe destacar que aunque las reservas de gas natural en el mundo están lejos de agotarse, los métodos de obtención del combustible restante en el planeta son costosos. El método más popular actualmente es el fracking o también denominado como fractura hidráulica, el cual se está intentando aplicar actualmente en España. Pero debido al rechazo social, producido por el impacto que esta técnica tiene sobre el medio ambiente y la salud de los habitantes, no se ha llegado a implementar [El País, 2017]

Esta técnica se usa para obtener gas natural de burbujas a mucha profundidad. Consiste en la perforación de un pozo, que llegue hasta la burbuja donde se encuentra el gas. Ese pozo será posteriormente entubado y cementado. Posteriormente se inyectará agua a alta presión de modo que ésta consiga penetrar en la roca produciendo una fractura controlada, que favorecerá la salida del gas hacia la superficie terrestre.

La técnica de fracking aunque es muy efectiva, tiene muchos inconvenientes como la posibilidad de contaminar el agua de poblaciones cercanas, produciendo así envenenamientos de comunidades enteras. También aumenta el riesgo de terremotos y se tiene muy poco conocimiento de la polución producida en la aplicación de fracking.

Hay otras técnicas que se están investigando para obtener gas natural procedente del suelo marino, con técnicas menos destructivas que el fracking. Países como Estados Unidos o Japón están a la cabeza en estas investigaciones [Expansión, 2015]

1.3 OBJETIVOS

El objetivo de este trabajo consiste en estudiar la combustión de metano en el quemador usado en el experimento de Roback y Johnson [Roback, 1983] mediante:

- Estudio de los patrones de flujo a lo largo del quemador y visualizar las diferencias entre los casos reactivos y no reactivos.
- Análisis de la influencia modelo de combustión y elección de uno como válido para las simulaciones.
- Estudio de la influencia de diferentes tipos de aditivos sobre los patrones de flujo y sobre la combustión.
- Estudio de la influencia del dosado de la mezcla sobre los patrones de flujo y sobre la combustión.

1.4 ANTECEDENTES

1.4.1 ANTECEDENTES DENTRO DEL EQUIPO DE TRABAJO

El estudio de este trabajo viene precedido por el realizado previamente por otros estudiantes de la Escuela de Ingenierías Industriales de Valladolid, tutelados por integrantes del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Universidad de Valladolid. Los estudios son los siguientes

Zamora, Javier Martín [2015]: Estudió el comportamiento de llamas con un número de Swirl relativamente bajo

García García, Luis Miguel [García, 2016]: Estudió las emisiones de un quemador de flujo rotante.

Gómez Escorial, Álvaro [Gómez, 2015]: Estudió el comportamiento de llamas con un número de Swirl alto.

Urueña Grimes, David [Urueña, 2014]: Implementó por primera vez el modelo de combustión PDF (Probability Density Function)

Pérez Domínguez, José Rubén [Pérez, 2016]: Estudió en su tesis doctoral la influencia del modelo de turbulencia y el diseño del generador de Swirl usando perfiles curvos.

1.5 ESTRUCTURA DE LA MEMORIA

La estructura de la memoria es la siguiente:

Capítulo 2: Se presenta el modelo físico y numérico del quemador utilizado en el proyecto y estado del arte del tema de quemadores rotantes.

Capítulo 3: Se estudian los patrones de flujo para el caso de mezcla y de reacción.

Capítulo 4: Influencia del modelo de combustión y del aditivo que se ha modificado para ver el efecto que éste tiene sobre los productos de la combustión y validación de los modelos de combustión.

Capítulo 5: Se estudia cómo influye la variación de concentración de combustible en el desarrollo de la combustión

Capítulo 6: Conclusiones y trabajos futuros

Anexos: Sumarios aportados por el programa CFD Ansys© Fluent de los tres modelos numéricos distintos, con objeto de poder reproducir las mismas condiciones en el futuro

2 CAPÍTULO

MODELO FÍSICO Y NUMÉRICO

2.1 PRESENTACIÓN

En este capítulo se describe el ámbito físico en el que se van a realizar las simulaciones así como el desarrollo teórico del modelo computacional y los pasos a seguir a la hora de realizarlas.

2.2 MODELO FÍSICO

Las simulaciones se llevarán a cabo en el entorno del quemador usado por Roback y Johnson [Roback, 1983]. Se trata de un quemador de configuración simple que puede darse con o sin difusor. Este tipo de quemadores requiere que el combustible y comburente no estén premezclados y sólo se junten una vez introducidos en la cámara.

La configuración del quemador (Figura 2.1) consta de:

- 2 toberas coaxiales por donde se introduce el combustible y comburente a la cámara de combustión. Por la tobera interior se introduce el comburente que en este caso es aire y por la exterior el combustible. La tobera interior es un cilindro de 30 mm de diámetro y la exterior tiene un diámetro interior de 32 mm y un diámetro exterior de 62 mm. Ambos tubos tienen una longitud de 94 mm.
- La cámara de combustión consiste en un cilindro de 1016 mm de longitud y 122 mm de diámetro. Ahí es donde se produce la mezcla de combustible con comburente.
- 50 mm aguas arriba de la cámara de combustión en la tobera exterior se encuentran 8 álabes fijos que proporcionan componente tangencial a la velocidad del comburente. Este conjunto se conoce como generador de Swirl.

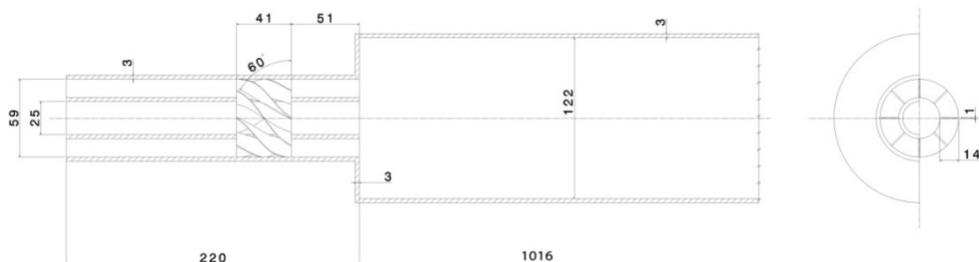


Figura 2. 1 Esquema con dimensiones del generador de Swirl

2.2.1 NÚMERO DE SWIRL

Para este estudio es importante tener en cuenta el número de Swirl del flujo de la tobera exterior. El número de Swirl representa el cociente promediado entre flujo axial de momento angular y el flujo axial de momento lineal, ambos multiplicados por el radio de salida [Gupta, 1984], como se puede observar este número es de adimensional.

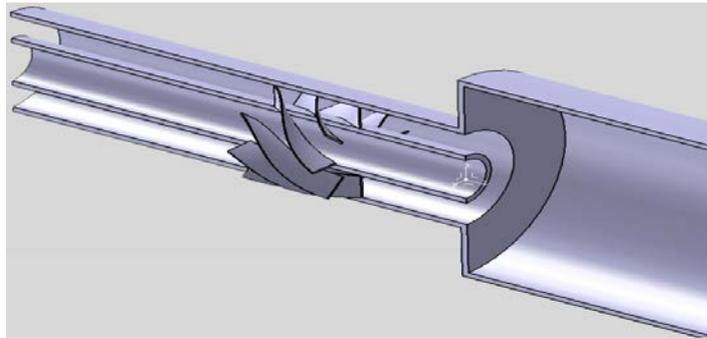


Figura 2. 2 Representación tridimensional del generador de Swirl

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

Ec 2. 1

Existen múltiples formas de variar el número de Swirl de un flujo, éstas son:

- Mediante el uso de álabes que den una componente tangencial al flujo.
- Mediante entradas de flujo axiales y tangenciales combinadas.
- Entrada de flujo tangencial directo a la cámara de combustión.

Para este estudio se usará el método de alabes fijos situados antes de la cámara de combustión y en la tobera exterior (por donde circula el comburente), como se puede ver en la Figura 2.1 y Figura 2.2.

Es importante ser capaz de caracterizar y optimizar el número de Swirl ya que éste tiene una influencia directa en el mezclado en la cámara y como consecuencia en las emisiones contaminantes a la atmósfera.

Se conoce que cuando el número de Swirl supera un valor crítico se produce una zona de circulación de forma de bulbo en la zona central de la cámara como, denominada como IRZ, consecuencia de la componente tangencial de velocidad.

2.3 MODELO NUMÉRICO

2.3.1 INTRODUCCIÓN

La rama de la mecánica de fluidos que se usa en este trabajo se denomina Mecánica de Fluidos Computacional o CFD (*Computational Fluid-Dynamics*). CFD se podría definir como el arte de sustituir las ecuaciones diferenciales que gobiernan los flujos (o reacciones) por números y mover estos números por el espacio o tiempo para obtener una descripción completa de las propiedades del flujo [Wendt, 2008]. Para llevar a cabo esta tarea es necesario crear modelos matemáticos que permitan la predicción de los sucesos que ocurrirán dentro del quemador. Estos modelos son los que se expondrán en este capítulo.

El método de resolución consiste en la discretización del flujo en volúmenes infinitesimales en donde se resuelven las ecuaciones obteniendo así valores en los nodos de los volúmenes.

2.3.2 SOFTWARE Y HARDWARE

Para la resolución de las ecuaciones se ha usado el software Fluent 6.3.26 en los ordenadores del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Valladolid.

El hardware usado ha sido un cluster de 5 ordenadores con las siguientes características:

- Procesador Intel i7 de 8 núcleos
- 16 GB de memoria RAM

2.3.3 RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE LAS ECUACIONES DE LA MECÁNICA DE FLUIDOS

Las ecuaciones a aplicar son:

- Conservación de la masa
- Conservación de la cantidad de movimiento
- Energía
- Energía cinética turbulenta
- Disipación de energía cinética turbulenta
- Fracción másica de especies químicas

Estas ecuaciones se deben modelar de manera que sea posible resolverlas con un ordenador, de tal manera que se define la ecuación genérica de la mecánica de fluidos cómo:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{Transitorio}} + \underbrace{\text{div.}(\rho\bar{u}\phi)}_{\text{Convectivo}} = \underbrace{\text{div.}(\Gamma_{\phi} \text{grad}\phi)}_{\text{Difusivo}} + \underbrace{\sum}_{\text{Fuente}} \quad \text{Ec 2. 2}$$

ϕ es una propiedad específica.

ρ es la densidad.

u es el vector velocidad.

Γ es el coeficiente de difusión de ϕ .

Siguiendo este modelo de ecuación genérica las ecuaciones mencionadas se expresarán de la siguiente manera:

Ecuación de la masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \quad \text{Ec 2. 3}$$

Donde u, v, w son los momentos en x, y, z respectivamente.

Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho wu) &= f_{v_x} + f_{s_x} \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho wv) &= f_{v_y} + f_{s_y} \\ \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uw) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vw) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w^2) &= f_{v_z} + f_{s_z} \end{aligned} \quad \text{Ec 2. 4}$$

Donde f_{vi} y f_{si} son las fuerzas de volúmen aplicadas al sistema.

Ecuación de la Energía

$$\frac{\partial \rho(e + V^2/2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[\rho(e + V^2/2)u] + \frac{\partial}{\partial y}[\rho(e + V^2/2)v] + \frac{\partial}{\partial z}[\rho(e + V^2/2)w] = W_v + W_s + q_{cond} + Q_{\text{reac+rad}} \quad \text{Ec 2. 5}$$

Ecuación de las especies químicas en función de la fracción másica de la especie k-ésima

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \text{div}(\rho \bar{u} Y_k) = \text{div}(\rho D_m \overline{\text{grad} Y_k}) + S_{Y_k} \quad \text{Ec 2.6}$$

El término fuente es debido a la reacción: $S_{Y_k} = M_k \dot{\omega}_k$

Y_k es la fracción másica de la especie química k-ésima.

2.3.4 MODELO DE TURBULENCIA

La turbulencia se define como una inestabilidad causada por el movimiento aleatorio y tridimensional observado en fluidos con un número de Reynolds moderadamente altos. Como típicamente los flujos para aplicaciones técnicas están compuestos por fluidos de baja densidad, la mayoría de flujos son turbulentos [CFD, 2013].

La turbulencia es causada por los gradientes de velocidad que causan torbellinos que a su vez causan nuevas inestabilidades que causan torbellinos más pequeños. Este proceso se repite hasta que los torbellinos son tan pequeños que la viscosidad adquiere importancia y se disipa toda la energía cinética. Este proceso se denomina cascada de energía.

No existe un único modelo de turbulencia. La elección del modelo adecuado para cada estudio depende de parámetros como el tiempo de computación disponible o el nivel de precisión requerido. Las tres opciones son: RANS, LES y DNS.

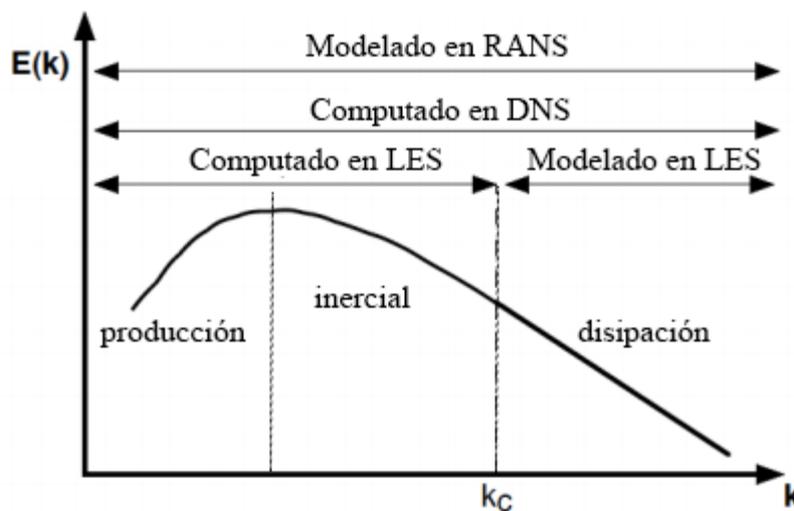


Figura 2. 3 Energía turbulenta según el tipo de modelo. [Poinsot, 2017]

En la Figura 2.3 se representa cada modelo en función de la escala de energía que se está estudiando.

2.3.4.1 DNS (Direct Numerical Simulation)

DNS es un método de resolución en CFD en donde las ecuaciones de Navier-Stokes son resueltas sin ningún modelo de turbulencia.

Los resultados obtenidos a partir de DNS serán flujos más finos, incluyendo en éstos sus propias inestabilidades (sus propias turbulencias) causadas por la inestabilidad e imperfecciones del medio continuo al haber usado discretización del volumen completo. [Kostic, 2007]

Como consecuencia de usar las ecuaciones de Navier-Stokes directamente, sin ningún modelo simplificador como en otros métodos, resulta que este método sea el que tiene un coste computacional más alto.

2.3.4.1.1 Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes son las ecuaciones (diferenciales) que gobiernan un medio continuo y fluido. Se trata de una ecuación vectorial (con tres componentes escalares) obtenida a partir de la Segunda ley de Newton aplicada al movimiento de un fluido. La solución se obtiene integrando las ecuaciones que gobiernan el comportamiento, incluida la de conservación de la masa y de la energía. [Kostic, 2007]

2.3.4.2 LES (Large Eddy Simulation)

Este modelo se utiliza para resolver grandes torbellinos, separa las grandes escalas turbulentas en equilibrio de los torbellinos disipativos. Para ello usa filtros que separarán el campo turbulento en dos componentes:

- Cinemática de las grandes escalas en el rango inercial
- Escalas disipativas

Como se ilustra en las Figuras 2.3 y 2.4 anteriores será necesario modelar las pequeñas (grandes números de onda) escalas. Es de gran influencia el refinamiento, debido a que cuanto más fina sea la malla el número de escalas modeladas será más pequeño.

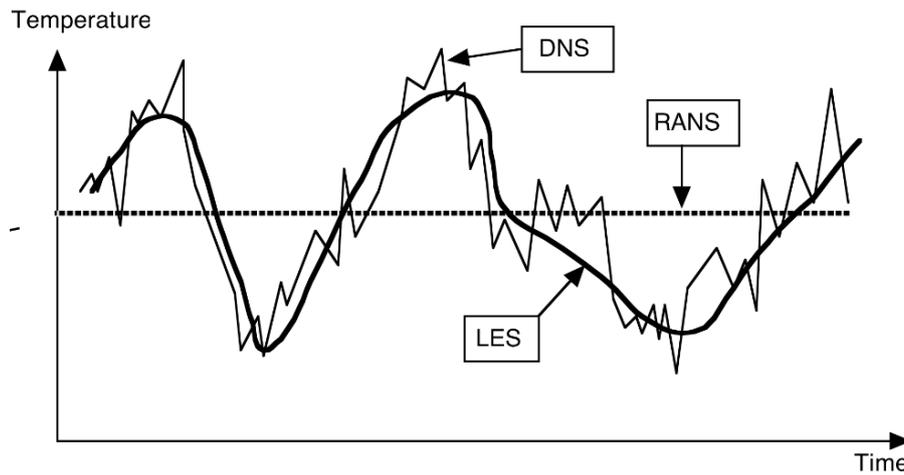


Figura 2. 4 Evolución temporal de la temperatura realizado con DNS, RANS y LES en una llama turbulenta. [Poinsot, 2017]

2.3.4.3 RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)

Este modelo consiste en promediar en el tiempo las fluctuaciones turbulentas del campo de velocidades previamente descompuesto. Este método tiene un gran inconveniente y un gran beneficio:

- El principal inconveniente es el problema de cierre que es causado debido a que el número de incógnitas es mayor que el número de ecuaciones. Cada tipo de modelo RANS soluciona este problema añadiendo una ecuación de conservación diferente.
- El principal beneficio es que el coste computacional se reduce sustancialmente. Por esta razón se usará este tipo de métodos de resolución de turbulencia ya que se ha demostrado que es el más adecuado para este tipo de aplicaciones. [Pérez, 2016]

Las propiedades de un fluido con un flujo turbulento se descomponen en dos: componente media y componente fluctuante:

$$\phi_i = \bar{\phi}_i + \phi'_i \quad \text{Ec 2.7}$$

Las ecuaciones de RANS son [Wiki RANS, 2017]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i) \quad \text{Ec 2.8}$$

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \rho \bar{f}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\bar{p} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \right]. \quad \text{Ec 2. 9}$$

Las nuevas incógnitas serán las tensiones de Reynolds y no las velocidades.

El modelo RANS ofrece distintas soluciones para el problema de cierre, éstas están representadas en la Tabla 1.1.

Tabla 1. 1 Modelos de turbulencia [Fluent, 2013]

Nombre	Nº de ecuaciones adicionales	Características
<i>Modelo Spalart-Allmaras</i>	Modelo de una ecuación	Diseñado especialmente para aplicaciones aeroespaciales, 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 más adecuado para este estudio es el K-ε RNG. Dentro de este modelo da mejores resultados el Swirl Dominated Flow (flujo dominado por el Swirl) [Pérez, 2016]. Este modelo es parecido al K-ε Standard, pero incluye más posibilidades:

- El modelo RNG tiene un término adicional en la ecuación de la disipación turbulenta (ϵ), convirtiéndolo en un modelo más exacto.
- El modelo RNG tiene mejor precisión para flujos rotantes (como es el flujo en este trabajo) al incluir el efecto del torbellino.
- El modelo K-ε Standard es utilizado para altos números de Reynolds, en cambio el RNG incluye una ecuación diferencial derivada analíticamente para la viscosidad efectiva que tiene en cuenta los efectos de Reynolds bajos. El inconveniente es que es dependiente de un correcto tratamiento de pared.

- El modelo RNG incluye una fórmula analítica para obtener el número de Prandtl, en cambio el K-ε Standard utiliza constantes. [Fluent, 2013]

2.3.5 MODELO DE COMBUSTIÓN

Este quemador ha sido diseñado para flujo no premezclado, lo cual quiere decir que el combustible y el comburente circulan por conductos diferentes (toberas interior y exterior) y la mezcla no se produce hasta que ambas llegan a la cámara de combustión. Ésta es una técnica muy utilizada debido a que es más segura dado que evita explosiones no queridas previas a la cámara de combustión [Boushaki, 2016] y también evita el retroceso de la llama en la cámara de mezcla.

La base del modelo de no premezcla se basa en un determinado conjunto de hipótesis de simplificación que definen el estado termoquímico instantáneo del fluido como relación con la fracción de mezcla: f . La fracción de mezcla se puede escribir en términos de la fracción de masa atómica como:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,comburente}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,comburente}} \quad \text{Ec 2. 10}$$

Donde Z_i es la fracción de masa elemental para el elemento, i . Comburente se refiere al oxidante y fuel al combustible. Si los coeficientes de difusión para todas las especies son iguales, entonces la ecuación es idéntica para todos los elementos, y por tanto la fracción de mezcla es única.

Las cinética química para flujos turbulentos pueden ser modeladas con tres modelos: PDF, ED (Eddy-Dissipation) y EDC (Eddy Dissipation Concept).

2.3.5.1 PDF (Probability Density Function)

Este modelo de transporte calcula el efecto turbulento de las llamas, el cual utiliza como modelo finite-rate de velocidad de reacción, es decir, el efecto de las fluctuaciones turbulentas se ignoran, y las velocidades de reacción son determinadas por las expresiones cinéticas de Arrhenius.

Una *Función Densidad de Probabilidad* (PDF), o densidad de una variable aleatoria continua es una función cuyo valor en cualquier punto en el espacio (conjunto de posibles valores que puede tomar la variable aleatoria) puede ser interpretado como la probabilidad de que la variable tome el valor dado. En otras palabras, mientras que la probabilidad de que una variable aleatoria tome un valor dado es 0 (porque hay un

número infinito de valores que puede tomar) el valor de la función PDF en dos muestras diferentes puede usarse para inducir que, en un momento concreto de la variable aleatoria cuanto más probable que tome un valor comparado con el otro. [Rose-Hulman, 2017]

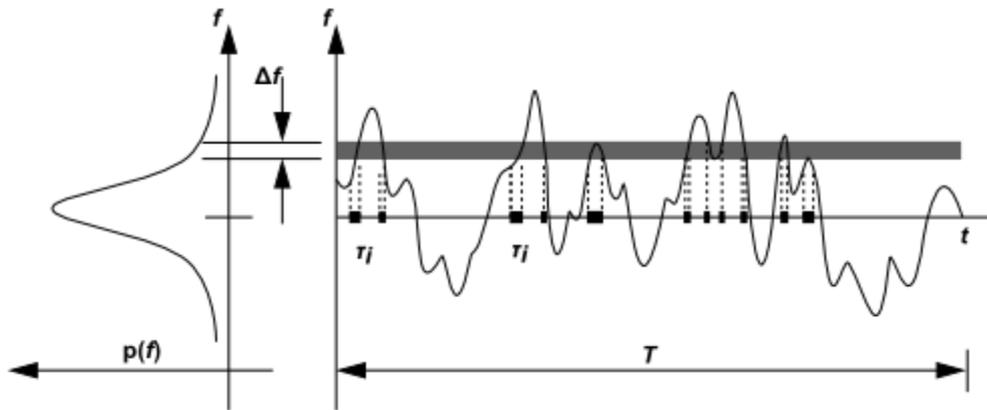


Figura 2. 5 Descripción gráfica de la función de densidad de probabilidad. [Fluent, 2013]

Las ecuaciones de transporte utilizadas en este modelo para la fracción másica media (\bar{f}) y su varianza ($\overline{f^2}$) en un flujo turbulento están descritas por [Jones & Whitelaw, 1982]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{f} \right)$$

Ec 2. 11

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \overline{f^2}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{f^2} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{f} \right)^2 - C_d \rho \frac{\epsilon}{k} \overline{f^2}$$

Donde σ_t , C_g y C_d son constantes.

Las ecuaciones de transporte predicen la fracción másica media y su varianza en un flujo turbulento. Estos valores promediados respecto al tiempo se pueden relacionar con la fracción de mezcla instantánea usando la *Función Densidad de Probabilidad* (PDF).

Hay varias formas y modelos estadísticos para la función PDF, siendo las más importantes la función de onda rectangular, la función doble delta, la distribución

Gaussiana y la función estadística β . Siendo esta última la más común y la que se utilizará para resolver los modelos computacionales.

La ventaja de este modelo es que puede predecir la formación de especies intermedias sin requerir el conocimiento de datos detallados de la cinética química. Este modelo solo representa las especies químicas más importantes que se llevan a cabo en la reacción [Fluent, 2013], por lo cual requiere un coste computacional menor que otros modelos.

2.3.5.2 ED (Eddy-Dissipation)

En este modelo las velocidades de reacción se asumen que están controladas por la turbulencia. Con esto se evita un gran coste computacional, derivado de suprimir la gran cantidad de ecuaciones cinéticas de Arrhenius.

Para poder obtener resultados realistas es necesario usar mecanismos de liberación de calor en uno (ED) o dos pasos (EDC). El EDC se diferencia del ED en que puede incorporar los mecanismos de cinética química y velocidades de reacción de varios pasos en flujos turbulentos. Esto se debe a que en ED todas las reacciones tienen la misma velocidad porque sólo hay un paso por reacción.

Se utiliza como referencia la obra de Magnussen y Hjertager [Fluent, 2009] que consiste en un modelo de interacción turbulencia-química. La tasa neta de la producción de especies i debido a la reacción r , donde $R_{i,r}$ está dado por la tasa de reacción más pequeña que se establece como el valor límite de las dos expresiones siguientes:

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\epsilon}{k} \min \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad \text{Ec 2.12}$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\epsilon}{k} \frac{\sum_p Y_P}{\sum_j v''_{j,r} M_{w,j}} \quad \text{Ec 2.13}$$

Donde:

Y_p representa la fracción másica de cualquier especie de productos P

Y_R representa la fracción másica de un reactivo particular R

A y B son constantes obtenidas experimentalmente.

En las ecuaciones expuestas, la velocidad de reacción se rige por la escala de tiempo de mezclado de torbellino, k/ϵ , como en el modelo Eddy-Breakup. Si se considera que hay turbulencia ($K/\epsilon > 0$) la combustión se producirá sin necesidad de una fuente para la ignición de la mezcla, aquí es donde son innecesarias las ecuaciones de Arrhenius, lo cual supone un ahorro computacional [Fluent, 2013]

2.3.5.3 EDC (Eddy Dissipation Concept)

Se trata de una extensión del modelo ED, que como se ha mencionado antes, incluye mecanismos químicos detallados en los flujos turbulentos. Aquí sí que son necesarias las ecuaciones de Arrhenius dado que aquí, las reacciones químicas se producen en varios pasos, contrario a ED donde se producían en un solo paso. Las reacciones se supone que se producen en pequeñas escalas turbulentas.

Este modelo incorpora escalas turbulentas más pequeñas en flujos turbulentos donde la combustión ejerce un papel importante. El modelo EDC ha demostrado ser eficaz sin tener que cambiar las constantes para una gran variedad de problemas de combustión con flujo premezclado (que no es el caso de este trabajo pero también será beneficioso en algunos casos), en donde la cinética química es más rápida que en flujos no premezclados, dado que en estos últimos hay que tener en cuenta el tiempo de mezclado.

La conexión entre el comportamiento de la estructura fina y las características de mayor escala de turbulencia como la energía de la turbulencia cinética, k , y su tasa de disipación, ϵ , está en el concepto de la EDC en base a un modelo de cascada energía de la turbulencia propuesto por Magnussen. (Magnussen, 2005)

2.4 ESTADO DEL ARTE

Este trabajo parte de la investigación previa en otros departamentos o empresas. A continuación se exponen algunas investigaciones de modelos tanto experimentales como computacionales.

2.4.1 INVESTIGACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO GAS-PARTÍCULA EN UN QUEMADOR DE TIPO SWIRL CON BAJAS EMISIONES DE NO_x – METODO DEM-CFD

En este artículo se estudió en flujo en un quemador que también es de tipo Swirl, con una configuración similar al que se estudia en este trabajo. Este artículo fue escrito Hao Zhou, Yu Yang y Lingli Wang en 2015. Los experimentos fueron llevados a cabo en el Instituto de Ingeniería Térmica de la universidad de Zhejiang en China.

El objetivo principal consiste en simular numéricamente el flujo dentro del conducto principal en un quemador tipo Swirl mediante DEM con CFD (método de elementos discretos con mecánica de fluidos computacional) y validar estos resultados computacionales con los resultados experimentales obtenidos de un modelo del quemador construido a escala. Para ello es necesario estudiar la influencia de la estructura del conducto principal del quemador y la influencia de las interacciones partícula-partícula, partícula-pared en la dispersión de las partículas. Los quemadores Swirl están diseñados principalmente para reducir las emisiones de NOx al exterior. Esto se consigue completando la reacción de combustión por fases (staged combustion)

En la estructura (Figura 2.6) del quemador se puede observar la entrada del aire con las partículas de carbón pulverizadas por una corona circular de diámetro superior de 590 mm, un tubo de Venturi donde se produce una concentración de las partículas de carbón y por último el generador de Swirl.

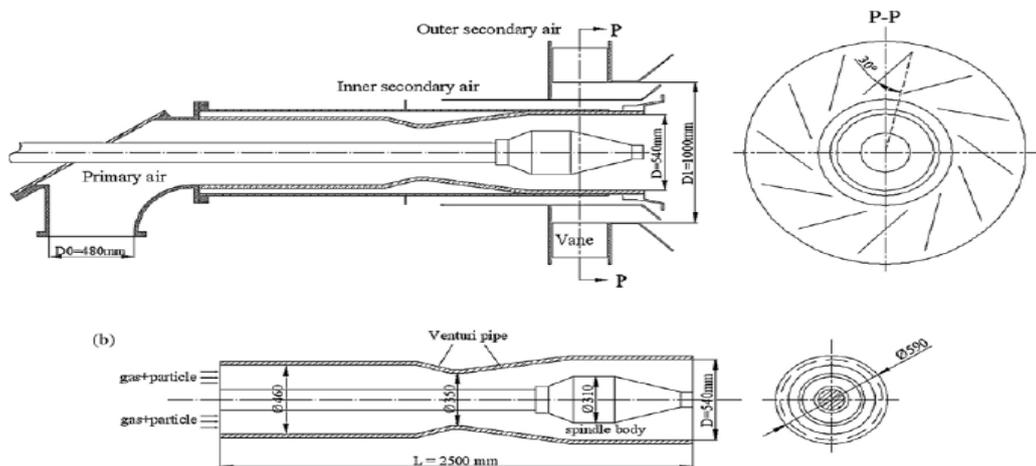


Figura 2. 6 Diagrama del quemador de Swirl (a) y la tobera de aire primaria (b) [Zhou, 2015]

El flujo de gas-partículas en el conducto principal se ha simulado numéricamente con DEM y CFD. La dinámica de las partículas individuales está gobernada por las leyes de Newton y la fase gas mediante el modelo de turbulencia RNG k-ε. Se usa este modelo en lugar del Standard debido a que este tiene en cuenta la turbulencia que provoca el Swirl. Posteriormente se demuestra que las colisiones entre partículas son muy importantes para el resultado final de la dispersión. De este modo se modelará para el rango microscópico mediante el modelo Euler-Lagrange. Para el rango microscópico se usará el modelo Euler-Euler. El modelo Lagrange-Euler se utiliza con tres hipótesis de partida: Las partículas son esféricas e inelásticas, las colisiones son inelásticas y sólo se consideran colisiones entre dos partículas. Para obtener resultados experimentales con los que validar el código se ha construido un modelo a escala (7 veces más

pequeño). Y con ayuda de un sistema PDA en tres dimensiones. Este es una herramienta muy útil para medir la dispersión de las partículas y la velocidad del flujo debido a que no es intrusivo. Debido a que la geometría del conducto es axial simétrica se usará una sección de 10º utilizando 272136 celdas hexaédricas.

Los resultados obtenidos numéricamente quedan validados con los resultados experimentales, obteniéndose mejores resultados cuando se consideran las colisiones entre partículas como se ha dicho anteriormente.

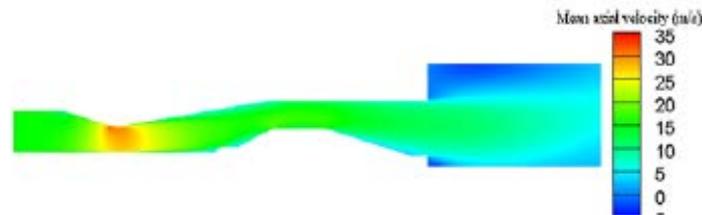


Figura 2. 7 Contornos de velocidad axial [Zhou, 2015]

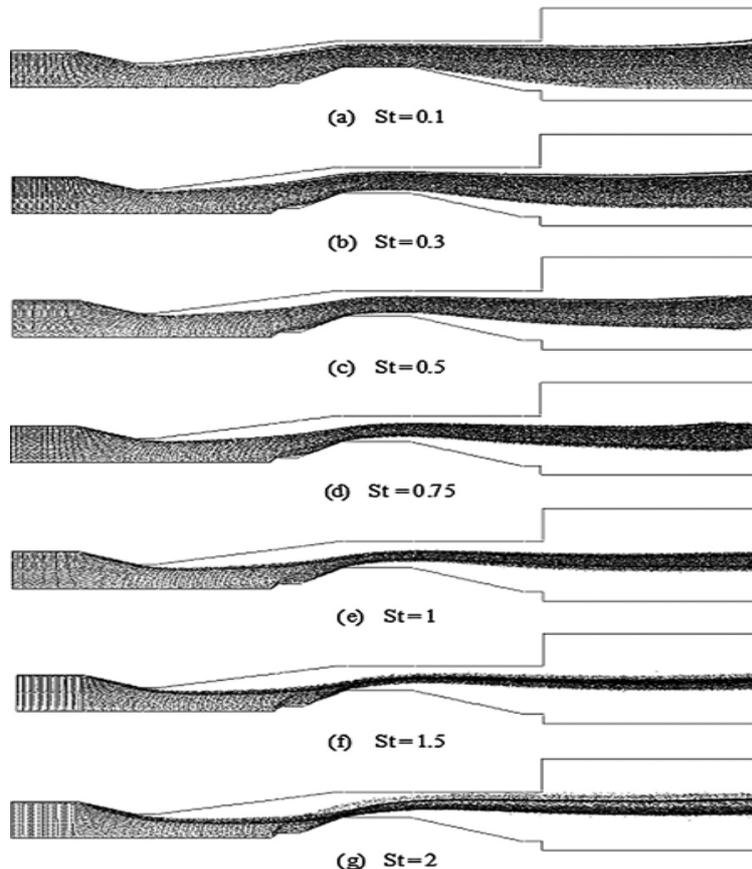


Figura 2. 8 Contornos de la distribución de partículas en función del número de Stokes [Zhou, 2015]

Como era de esperar la velocidad axial máxima se produce en la garganta del tubo de Venturi, Figura 2.7. Como se puede observar en la Figura 2.8 el tubo de Venturi y el

cuerpo giratorio producen un guiado de las partículas con un número de Stokes alto. Lo cual es obvio debido a que esto es lo que representa el número de Stokes. Este fenómeno produce que las partículas estén concentradas en una pequeña zona de alta densidad durante una larga trayectoria, lo que favorecerá la combustión por fases.

Se obtiene que las partículas con un número de Stokes alto quedan concentradas en una fina línea. Los modelos que mejor representan el comportamiento en el quemador son los que tienen en cuenta las colisiones entre partículas.

2.4.2 CARACTERIZACIÓN TÉRMICA DE LA COMBUSTIÓN DE CARBÓN/PAJA BAJO DIFERENTES CONDICIONES DE OXIGENACIÓN EN UN QUEMADOR DE TIPO SWIRL

Este estudio fue realizado por los investigadores Arafat A. Bhuiyan y Jamal Naser de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Tecnología de Swinburne, Australia. Al igual que en el caso anterior y en este TFG se estudia un quemador de tipo Swirl, aquí variando la composición del comburente.

El objetivo principal de este estudio es ilustrar el impacto en las características de la combustión, incluidas la temperatura de llama y emisiones para carbón puro frente a biomasa pura quemados en una atmósfera de oxy-fuel y de aire.

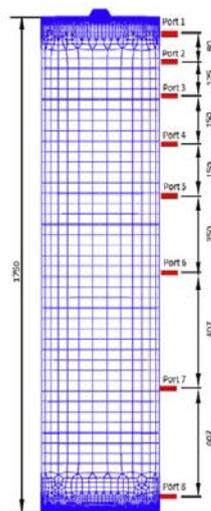


Figura 2. 9 Esquema con dimensiones del quemador [Arafat, 2016]

Debido al cambio climático es necesario reducir las emisiones de CO₂ al ambiente. Dado que la gran mayoría de emisiones de CO₂ son producidas en las centrales de

energía eléctrica y la mayoría de éstas usan como combustible el carbón debido a su bajo precio. Es posible reducir estas emisiones utilizando como combustible además del carbón, biomasa. En este caso se estudiará el uso de paja como combustible. Este es un método muy fácil de implantar dado que no sería necesario cambiar el diseño de las centrales eléctricas. También se estudiará cómo se comporta la mezcla de combustible usando diferentes oxy-fuels. Se compararán cuatro mezclas de combustible: 100% paja, 20% paja y 80% carbón, 50% de carbón y de paja y 100% carbón. En 4 atmósferas diferentes: 20% de O₂ (aire), 25%, 30% y 35% de O₂

Se usará un horno sin recirculación como se ve en la Figura 2.9. El quemador rotante se sitúa en la parte de arriba. No hay conducto para la recirculación del fuel.

El modelo de combustión se ha conducido mediante el código comercial AVL Fire version.2009.2. La fase gaseosa será descrita mediante las ecuaciones de Navier-Stokes de conservación bajo la formulación de Euler.

El modelo de turbulencia usado es el k- ϵ standard. Las partículas de paja se han considerado irregulares con un aspect ratio muy alto (1:25). Por la literatura se justifica usar un modelo multi-paso frente a uno de un solo paso. El estudio numérico es validado usando la temperatura predicha en la literatura.

Como se ha dicho antes el objetivo es comparar los diferentes combustibles y las diferentes atmósferas.

Diferencias entre atmósferas:

El quemador queda caracterizado por el Swirl que proporciona un mejor mezclado, estabilización de la llama, suficiente tiempo para que finalice la reacción.

Los resultados obtenidos son: Se producen dos zonas de recirculación en la parte superior del horno. Cuanto mayor concentración de oxígeno en el comburente menor velocidad de reacción y se obtiene una llama más enriquecida.

Distribución de las especies

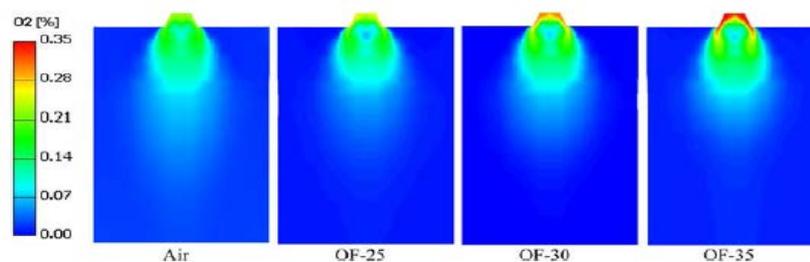


Figura 2. 10 Fracción másica de O₂ [Arafat, 2016]

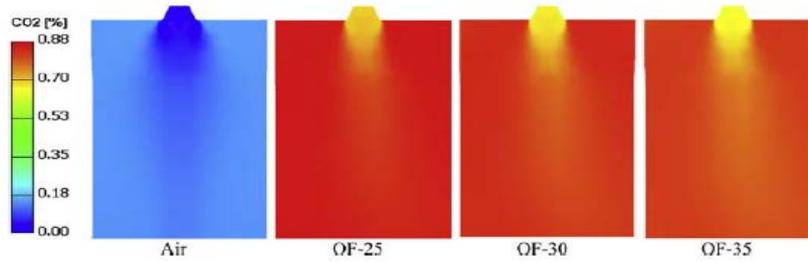


Figura 2. 11 Fracción másica de CO_2 [Arafat, 2016]

Como se observa en las Figuras 2.10 y 2.11 se obtiene una similar distribución de O_2 para el aire y OF-25 (20% y 25% de O_2) y también una distribución similar para OF-30 y OF-35. Para las composiciones de OF-30 y OF-35, como era de esperar, se produce una combustión más rápida.

El tiempo de residencia en función de las diferentes atmósferas está representado en la Tabla 2.2

Tabla 2. 2 Tiempo de residencia en función de la atmósfera de combustión

Predicted average residence time for different combustion environments.

Oxidizer	Residence time, T (s)
Air-firing	2.60
25% O_2/CO_2	3.47
30% O_2/CO_2	3.70
35% O_2/CO_2	4.20

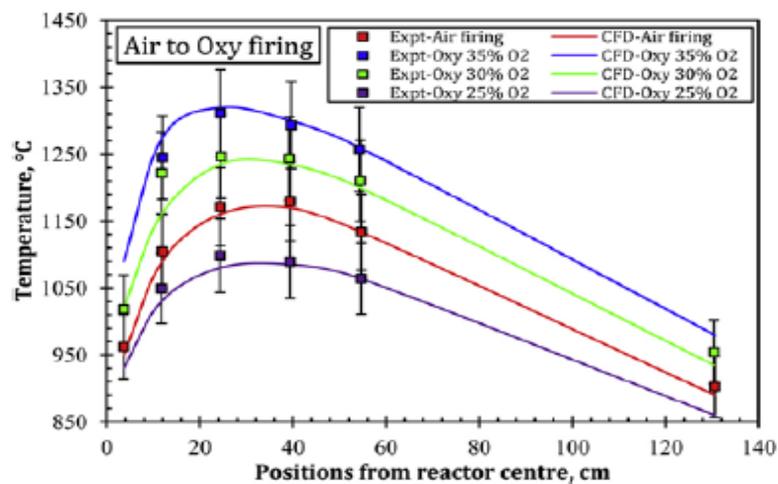


Figura 2. 12 Temperatura en función del radio para diferentes atmósferas

Como se observa en la Tabla 2.2 a mayor concentración de O₂ se produce un mayor tiempo de residencia, debido a la menor velocidad del flujo como se ha explicado anteriormente. A mayor concentración de O₂ se obtiene una mayor temperatura de llama (Figura 2.12). También se observa que la temperatura máxima de la llama disminuía según aumentaba la cantidad de paja en el combustible. Esto se puede explicar dado que el poder calorífico de la paja es menor que el del carbón. Se obtiene que cuando se usa 20% de paja apenas varían las temperaturas de llama.

Obtención de CO para diferentes combustibles:

La concentración de CO mejora cuando se usa oxy-fuel en lugar de aire como comburente. En función de los combustibles, el peor resultado se obtiene cuando se quema 100% de paja debido a que el tiempo de residencia es mucho mayor

Se comprueba que al usar un combustible con 20% de paja apenas varían las características del proceso. Se obtiene un ligero decrecimiento en la temperatura de llama. También se obtiene que al aumentar la concentración de paja se obtienen mayores emisiones de CO, debido a que se aumenta el tiempo de residencia.

2.4.3 RESPUESTA DE LA TEMPERATURA DE LA SUPERFICIE DEL QUEMADOR EN FUNCIÓN DE LAS TRANSICIONES DE UNA LLAMA TURBULENTA Y BIESTABLE

Este estudio fue realizado por Zhiyao Yin, Patrick Nau y Wolfgang Meier en el Centro Aeroespacial Alemán en Stuttgart, Alemania.

Objetivo: desarrollar un sistema que sea capaz de diagnosticar, de manera temporal y espacial, el efecto de las transiciones entre llamas sobre las paredes del quemador

Las llamas turbulentas están caracterizadas por estar en transición constante entre llamas de tipo M y de tipo V. Estudios anteriores en los que se trabaja con llamas estabilizadas con Swirl (principalmente en turbinas de gas), se ignora parcialmente las paredes del quemador asumiendo que son adiabáticas o a temperatura constante. En este estudio sí que se consideran pérdidas de calor por las paredes, dado que éstas tendrán un papel importante en las transiciones entre llamas con forma M y V.

En las condiciones de operación la llama cambia periódicamente entre forma V y M (biestable). Estos resultados se obtienen mediante el uso de un láser y una cámara de alta frecuencia. Mediante una pintura fosforescente cuya vida media tiene una fuerte dependencia con la temperatura, se obtienen las temperaturas de las paredes del horno.

Como se puede observar en la Figura 2.13 la temperatura en las paredes a penas varía entre los dos tipos de llama. Sin embargo cuando la llama tiene forma V la temperatura en la base del horno (bluff body) es unos 100 K mayor. Esto se debe a que la llama con forma M está separada de la base y la V no. Esta es la única diferencia dado que los perfiles son prácticamente iguales.

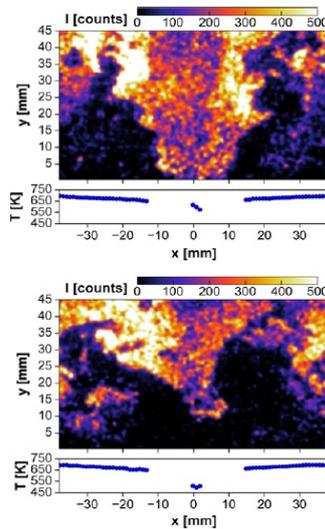


Figura 2. 13 a) Llama con forma V b) Llama con forma M [Yin, 2017]

En la Figura 2.13 se puede ver la transición entre las dos llamas. Dado que la temperatura en la boca del horno es unos 100 K menor cuando se da la llama en M, la intensidad de la pintura disminuye. En la segunda imagen se observa la temperatura en las paredes del horno a una distancia de 27 mm de la base. Se ve que ocurre lo opuesto que en la segunda imagen de la Figura 2.13, cuando la llama tiene forma de M la temperatura aumenta en las paredes, esto se debe a que con la forma de M más gas caliente está en contacto con las paredes. En conclusión, la zona más sensible a las transiciones entre llamas es el “bluff body” (entrada de gas al horno) dado que este está siendo refrigerado siempre por el gas que entra sin quemar. En cambio la base del horno y las paredes a penas experimentan fluctuaciones.

En esta sección se examina la influencia de la incertidumbre de las medidas obtenidas con el TP (pintura fosforescente). Donde se han obtenido mayores fluctuaciones es la zona donde se han podido obtener peores resultados. Esto es en la entrada de los gases al horno (bluff body). Especialmente notable cuando se forma la llama en M ya que la pintura tiene menos sensibilidad a bajas temperaturas. Se concluye que para una mejor obtención de resultados conviene usar un TP con un mayor rango de temperaturas.

La llama cambia periódicamente en las condiciones de trabajo (no se incluyen aquí)

Se captura la respuesta de las paredes, del bluff body y de la base del horno durante 8 segundos en los que se producen estas transiciones.

Los resultados muestran que en el bluff body se producen variaciones de hasta 100 K en cada transición.

En las paredes y en la base se producen fluctuaciones de temperatura mínimas en comparación con lo anterior.

2.4.4 ESTUDIO DE LAS EMISIONES CONTAMINANTES Y DINÁMICA DE LLAMAS NO PREMEZCLADAS Y TURBULENTAS EN UN QUEMADOR DE SWIRL

Este estudio fue realizado por Toufik Boushaki, Nazim Merlo, Christian Chauveau y Iskender Gökalp en la Universidad de Orlèans, Francia. En este artículo se muestra el estudio de un quemador de Swirl con llama no premezclada al igual que en este TFG. Una diferencia fundamental con este TFG es que varían las atmósferas en las que se quema en metano, sin embargo esto fundamentalmente afecta a las emisiones contaminantes.

Los combustibles gaseosos emiten menos CO₂ en comparación con carbón o derivados del petróleo. Por razones de seguridad es mejor trabajar con combustiones con una mezcla sin premezclar. Los procesos de combustión que se producen sin premezclar el combustible y el comburente producen mayores emisiones de NO_x. Un quemador ideal debe combinar las ventajas de ambos métodos, es decir evitar explosiones de la mezcla llevando el combustible y el comburente por conductos separados, pero producir una llama de características similares a la que se produciría si estuviesen premezclados. Aquí se estudiarán las características de un quemador con una configuración tal que produzca los resultados mencionados. Además de las emisiones de NO_x hay que reducir las emisiones de CO₂. La captura de CO₂ postcombustión con métodos químicos resulta muy costosa. El uso de Oxy-fuel es una solución elegante pero penaliza el rendimiento energético debido a la generación de oxígeno. La captura de CO₂ usando barreras físicas como membranas supone una solución barata hasta que se desarrollen tecnologías baratas para la obtención de oxígeno. Para poder usar una membrana es necesario que el contenido de CO₂ en los gases de salida sea mayor del 20%, lo cual se conseguirá aumentando ligeramente la concentración de oxígeno de la mezcla. Un aumento de la concentración de O₂ provoca un aumento de la producción de NO_x debido a que se aumenta el tiempo de residencia. El objetivo de este trabajo es combinar una buena configuración del quemador con un

enriquecimiento de oxígeno del comburente para que se produzcan pocas emisiones de NOx y al menos 20% de CO₂ para que pueda ser capturado por la membrana.

Como está representado en la Figura 2.14 el quemador usado consta de dos tubos concéntricos. Por la parte anular fluye el oxidante. Contiene 8 álabes diseñados con distintos ángulos para producir variaciones en el Swirl. Por el tubo central fluye el combustible (gas) que es impulsado radialmente por 8 agujeros distribuidos simétricamente

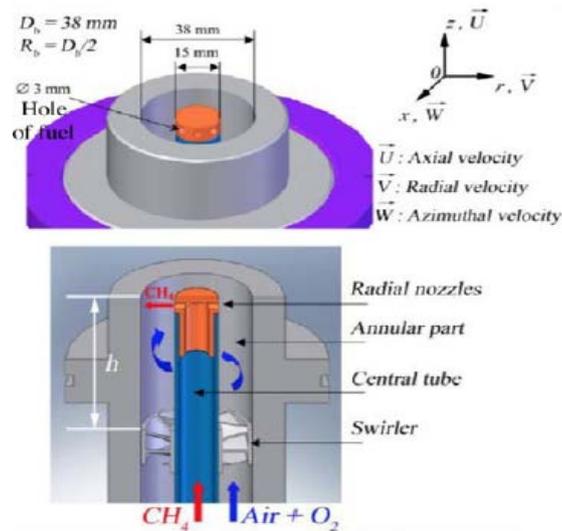


Figura 2. 14 Representación del quemador [Boushaki, 2017]

Esta configuración provoca un flujo tridimensional, no axial simétrico. Las paredes de la cámara de combustión son refrigeradas con agua. Las medidas serán tomadas para concentraciones de oxígeno desde 21% (aire) a 30%. Las medidas serán tomadas para números de Swirl de 0,8 y 1,4. Para la toma de medidas se usa S-PIV (Stereo Particle Image Velocimetry) para los flujos tanto antes de la combustión como después. Como fuente de luz se usa un láser y para la toma de imágenes dos cámaras orientadas perpendicularmente a los láseres.

En la Figura 2.15 se muestra las velocidades axiales y tangenciales en condiciones de reacción y de no reacción. Como era de esperar debido a la alta intensidad del movimiento de Swirl, se produce una zona de recirculación para reacción o no reacción. Esta recirculación es mayor para las condiciones de reacción dado que la densidad varía cuando se produce la combustión.

En la Figura 2.16 se representa el flujo de recirculación para dos números de Swirl distintos (0,8 y 1,4) con dos concentraciones de oxígeno (21% y 30%) para condiciones de combustión y de no combustión. En condiciones de no combustión un aumento del número de Swirl mejora la recirculación, sin embargo, para condiciones de combustión

las diferencias entre los dos números es insignificante. Esto se debe a que la reacción de combustión disminuye los efectos del Swirl.

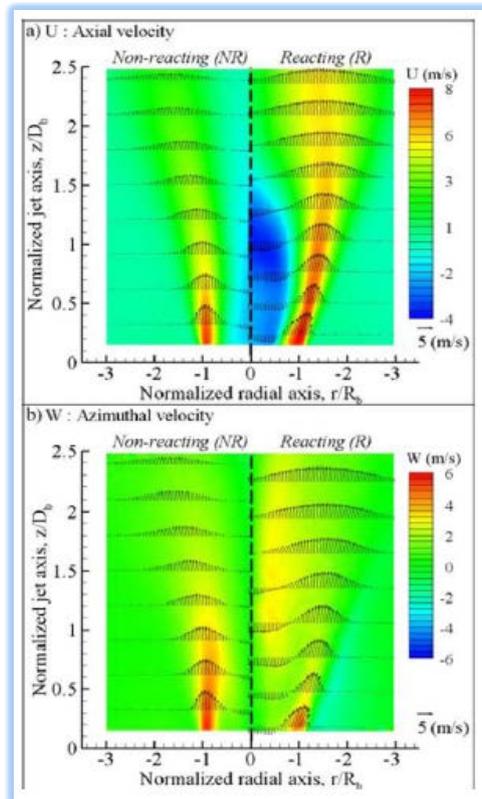


Figura 2. 15 Representación de velocidades axial y tangencial [Boushaki, 2017]

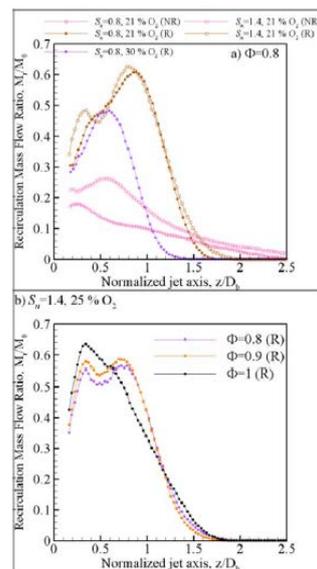


Figura 2. 16 Ratio de circulación en función del radio adimensionalizado [Boushaki, 2017]

Se ha provocado que el combustible sea inyectado directamente en el flujo rotante donde la energía cinética de turbulencia es máxima para que se produzca la mejor mezcla posible.

La Figura 2.17 muestra las emisiones para un número de Swirl de 1,4. Aproximar el valor del dosado al estequiométrico provoca una gran disminución de las emisiones para cualquier tipo de comburente, especialmente para aquellos con bajo contenido de oxígeno.

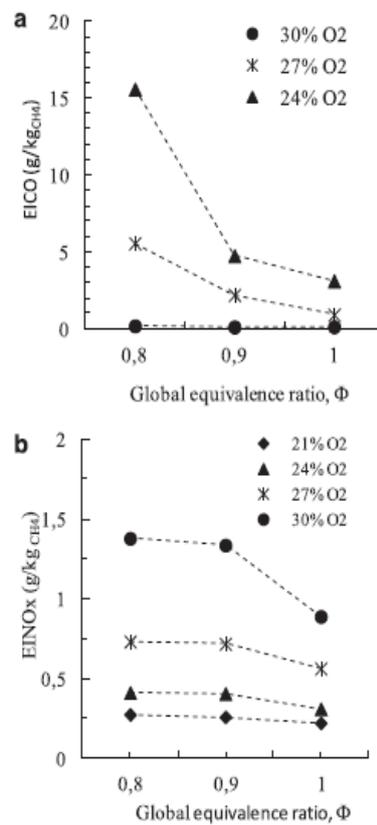


Figura 2. 17 Emisiones de NO_x en función del dosado para las diferentes atmósferas [Boushaki, 2017]

Las emisiones de NO_x y de CO₂ al contrario que las de CO aumentan cuando se usa un comburente más enriquecido. Al aumentar el dosado aumenta la producción de CO₂, lo que conlleva un aumento del CO₂ recirculado. El CO₂ reacciona con el NO destruyendo las partículas de éste, por ello, cuando aumentamos el dosado, las emisiones de NO_x disminuyen.

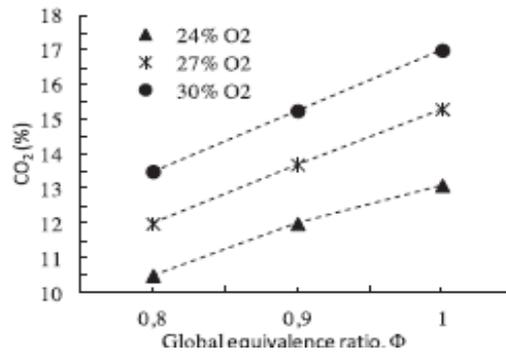


Figura 2. 18 Emisiones de CO₂ en función del dosado para las diferentes atmósferas [Boushaki, 2017]

En este trabajo se investiga las características de llamas no premezcladas con un énfasis en las emisiones de CO, CO₂ y NO_x. Los resultados muestran una clara influencia del Swirl en las recirculaciones dentro de la cámara de combustión. Siendo más influyente en los casos en los que no hay reacción. En cuanto a las emisiones: El enriquecimiento de oxígeno produce una mejora en las emisiones de CO y de CO₂ (disminuyendo la primera y aumentando la última) aunque produce un aumento de las emisiones de NO_x por el aumento de temperatura de la llama. Aunque si se mantiene la concentración de oxígeno por debajo del 30% las emisiones de NO_x son aceptables.

2.4.5 INVESTIGACIÓN NUMÉRICA DE LLAMAS CON SWIRL Y TURBULENTAS CON VALIDACIÓN DEL MODELO DE TURBINA DE GAS

Este artículo fue realizado por los investigadores Ali Cemal Benim, Soail Iqbal, Wolfgang Meier, Franz Joos y Alexander Wiedermann de diferentes centros de investigación cada uno. En este artículo, al igual que en anterior, se trabaja con un quemador de tipo Swirl, aunque lo realmente interesante y aplicable en este TFG es la investigación sobre los modelos numéricos de simulación.

A las turbinas de gas modernas se les exige una alta eficiencia y estabilidad a la vez de que cumplan unos requisitos de emisiones. Dentro de las turbinas, el quemador es un componente fundamental y ser capaz de comprender los procesos que se dan dentro de éste es de gran importancia. La investigación experimental de las turbinas de gas puede ser complicada dada la poca accesibilidad de éstas, por ello las simulaciones numéricas son de gran utilidad. Para las simulaciones numéricas uno de los principales problemas que surgen es el modelado de la turbulencia, que además es uno de los principales objetivos de este estudio. Para ello se aplicarán los modelos de turbulencia URANS (Unsteady Reynolds Averaged Numerical Simulations), RANS (Reynolds Averaged Numerical Simulations) y LES (Large Eddy Simulations). Un método que es

adecuado para modelar la interacción química-turbulenta es el EDC (Eddy Dissipation Concept). Un inconveniente de este modelo es su mayor exigencia computacional. Otro método alternativo al EDC es el LFM (Laminar Flamelet Method). Este método no supone una carga computacional tan alta como el EDC, pero su validez para estos casos ha sido puesta en duda anteriormente. En este estudio serán utilizados ambos métodos

Como en la mayoría de quemadores el aire es introducido por el tubo exterior, habiendo sido aplicado un movimiento rotatorio que provoca un mejor mezclado. Por el tubo interior se impulsa el combustible (metano).

Se usará el código OpenFoam con una corrección de presión (PIMPLE). Las pérdidas de calor por radiación han sido despreciadas. Para describir el modelo de turbulencia se usará o URANS o LES. En las zonas de pared se usan las funciones estándar de pared. Para URANS todos los términos convectivos son discretizados por el esquema Upwind lineal que es de segundo orden. Para LES se usa el esquema de diferencias centradas que también es de segundo orden. El tiempo de paso ha sido escogido para que el número de Courant siempre sea menor que la unidad. Como se ha dicho antes se usan dos modelos para la combustión: EDC y LFM. La pared de entrada se sitúa al finalizar los álabes. En esta posición todas las variables quedan definidas excepto la presión. La pared de salida se ha situado en el canal de salida de la cámara. Se han usado cuatro mallas con 2×10^6 , 4×10^6 , 6×10^6 y 8×10^6 celdas y se obtiene que la malla con 4×10^6 celdas es la que mejores resultados obtiene con menor coste computacional para las simulaciones con LES. Para las simulaciones con RANS se usa una malla con 2×10^6 celdas. Ambas mallas satisfacen el Grid Index dependiente de la escala de Kolmogorov

Cualitativamente las tres simulaciones predicen una velocidad axial similar como se observa en la Figura 2.19. En el caso de URANS-LFM se sobreestima la velocidad de la zona de recirculación. Para la velocidad tangencial, los resultados que más se parecen a los obtenidos experimentalmente son los obtenidos con LES-EDC. En cuanto a los perfiles de temperatura los mejores resultados se obtienen con LES-EDC.

Comparación de los tiempos de computación viene reflejada en la Tabla 2.2

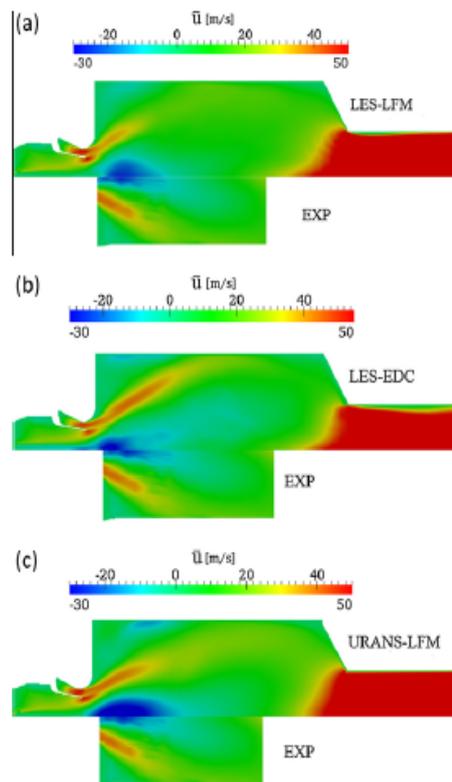


Figura 2. 19 Comparación de la velocidad axial para los diferentes modelos [Benim, 2017]

Tabla 2. 1 Comparación de los resultados obtenidos con los diferentes modelos [Benim, 2017]

Comparison of the computational clock-times.

Method	# Transport equations	Grid size	Relative clock-time
URANS-LFM	9	2×10^6	1
LES-LFM	7	4×10^6	2.2
LES-EDC	10	4×10^6	10.8

Las simulaciones se realizaron en un cluster de 48 ordenadores. Para que los cálculos convergieran se necesitaron 5-6 semanas.

Se ha simulado numéricamente el comportamiento dentro de la cámara de combustión de una turbina de gas con el código Open Foam. Como modelos de turbulencia se han usado LES y URANS. Como modelos de combustión se ha usado EDC y LFM. Se ha observado que el modelo LES proporciona unos resultados mejores que el URANS aunque este último requiera un tiempo de computación de aproximadamente la mitad. LFM y EDC proporcionan resultados similares, pero teniendo en cuenta que el

gasto computacional exigido por LFM es mucho menor lo convierte en la solución más atractiva.

2.5 CONCLUSIONES

Debido a trabajos anteriores en el mismo departamento (Pérez, 2016 y Escorial, 2015, etc.) se parte de la premisa que el modelo de turbulencia a usar será el RNG K- ϵ con el flujo dominado por el Swirl.

En cuanto al modelo de combustión se usará preferentemente el PDF ya que es el más adecuado para combustión no premezclada, no obstante se usará también el EDC y Finite-Rate con el objetivo de validar y comparar los resultados obtenidos.

3 CAPÍTULO

PATRONES DE FLUJO

3.1 PRESENTACIÓN

En este capítulo se analizarán los distintos patrones de flujo obtenidos en los distintos experimentos. Se pondrá énfasis en estudiar las zonas de recirculación dado que es ahí donde se tiene una mayor producción de sustancias contaminantes del tipo NOx (óxidos de nitrógeno) al aumentar el tiempo de residencia sometidos a altas temperaturas, pero a su vez pueden ayudar a estabilizar la llama [Atmosferis, 2017].

Las condiciones de contorno de los experimentos realizados en este capítulo (Tabla 3.4) representan el experimento más genérico realizado en este trabajo. Posteriormente se harán variaciones en prácticamente todos los parámetros excepto en las características geométricas del quemador ya que se trabaja en todo momento con el mismo quemador y no se pueden variar las dimensiones de éste.

La malla que utilizada en la mayoría de los casos se puede ver en la Figura 3.1. Se trata de una malla constituida por 436.205 celdas tetraédricas. Esta será la malla usada para los casos en los que se simule el quemador completo. Para los casos en los que se simula un cuarto de quemador caso 1, caso 1.3, caso 2.1 y caso 2.2 se usará la malla expuesta en la Figura 3.2, que consta de 420.973 celdas.

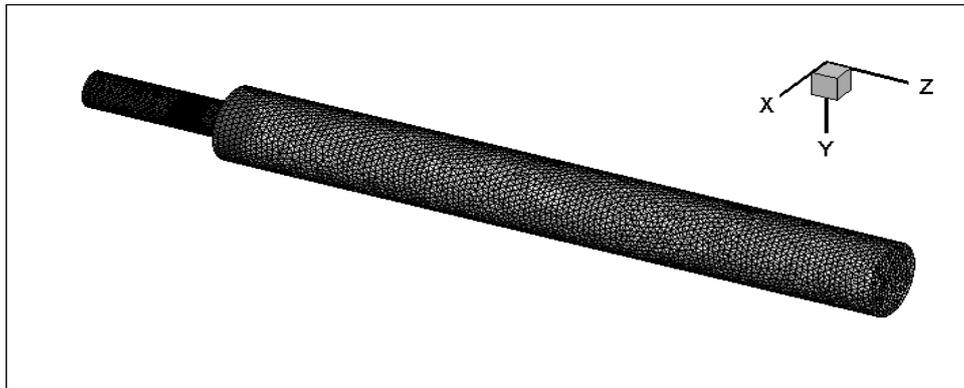


Figura 3.1 Malla del quemador completo

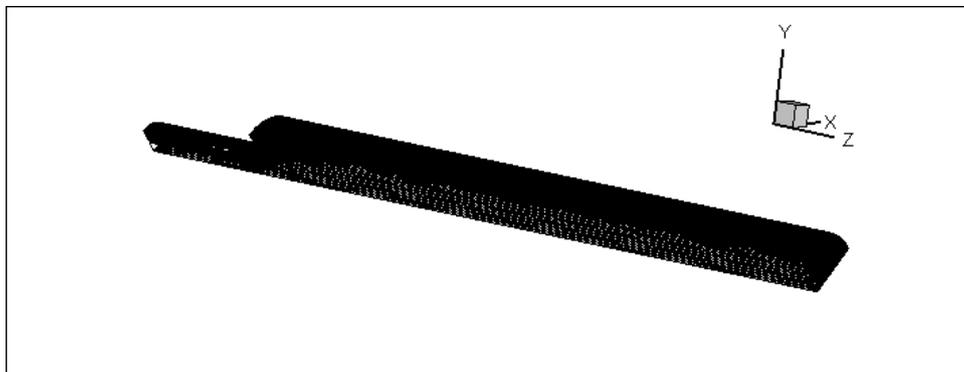


Figura 3.2 Malla de cuarto de quemador

Durante este trabajo se estudiarán diferentes casos habiendo variado en cada uno de ellos uno de los siguientes parámetros: Dosado (proporción de combustible/comburente), composición del aditivo, propiedades del aditivo y modelo de combustión. Los distintos casos están expuestos en la Tabla 3.1 y Tabla 3.3.

Como se ha explicado en el capítulo anterior por la tobera interior se inyecta la mezcla combustible formada por gas natural mezclado con uno de los tipos de aditivo. En la industria se pueden usar como aditivos, entre otros, nitrógeno, hidrógeno o amoníaco. El nitrógeno es generalmente una mala idea debido a que facilita las emisiones de óxidos de nitrógeno a la atmósfera al igual que el amoníaco [Valera-Medina, 2017]. En este quemador se usa un aditivo inerte con las mismas propiedades del metano [Roback, 1983] pero esto es problemático a la hora de ser simulado computacionalmente debido a que no se conocen la composición exacta de este aditivo, de manera que se ha procedido a simular esta sustancia inerte de todas las maneras posibles con el software Fluent 6.3:

- En caso de que la simulación se realice con EDC es sencillo obtener el aditivo ya que se usa CH₄ quitando la capacidad de formar reacciones químicas al eliminar la fórmula química.
- En caso de que la simulación se lleve a cabo con PDF será necesario modificar la base de datos de Fluent añadiendo nuevos elementos químicos con las propiedades que se deseen.
- También se llevan a cabo simulaciones con un elemento inerte que se pueda asegurar que no reaccionará con nada, en este trabajo se ha usado el helio.

De esta manera se obtienen 5 tipos de aditivos que se usarán en este trabajo:

- Aditivo del tipo 1 (add1): Se usa un compuesto cuyas moléculas están compuestas por 4 átomos de helio. Este compuesto obviamente no existe en la realidad pero proporciona una sustancia inerte con un peso molecular muy parecido al del metano.
- Aditivo del tipo 2 (add2): Se utiliza la molécula de CH₄ almacenada en la base de datos de Fluent pero se le elimina la fórmula química de manera que (a priori) se le impide la participación en cualquier reacción química.
- Helio: Se usa el elemento real helio (He).

En la Tabla 3.2 se pueden observar las propiedades de cada aditivo. Donde:

ρ representa la densidad

μ representa la viscosidad dinámica

K representa la conductividad térmica

C_p el calor específico a presión constante.

Tabla 3. 1 Descripción de cada caso

Caso	Aditivo	Modelo de Combustión	Swirl Factor	Malla
Caso 1	Add 2	Mezcla	0.001	Cuarto de quemador
Caso 1.3	Add 2	Mezcla	0.07	
Caso 2.1	Add 2	EDC	0.001	
Caso 2.2	Add 2	EDC	0.07	
Caso 0	Add 2	Mezcla	0.001	Quemador completo
Caso 3	Add 2			
Caso 4	Add 1	EDC		
Caso 5	He			
Caso 7	Add 2			
Caso 8	Add 1	PDF		
Caso 9	He			
Caso 11	Add 2	ED		

Tabla 3. 2 Propiedades de los aditivos

Aditivo	ρ (kg/m ³)	μ (kg/ms)	K (W/mK)	Cp (kJ/Kkg)	Prandtl
He	0.1625	1.12E-05	0.152	5300	3.91E-01
Add 1	0.65	1.12E-05	0.152	5300	3.91E-01
Add 2	0.656	1.99E-05	0.0332	2200	1.32E+00

Tabla 3. 3 Descripción de los casos con diferente dosado

Caso	Aditivo	Modelo de Combustión	Swirl Factor	Malla
Caso_POBRE.PDF	Add 2	PDF	0.001	Quemador completo
Caso_POBRE.EDC		EDC		
Caso_RICA.PDF		PDF		
Caso_RICA.EDC		EDC		
Caso_RICA.100.PDF		PDF		
Caso_RICA.100.EDC		EDC		

Como explicación adicional a la Tabla 3.1 cabe destacar la razón de cada experimento:

- Los cinco primeros casos servirán para estudiar el comportamiento de la malla de cuarto de quemador además de proporcionar el efecto de la variación del Swirl Factor.
- Los casos 0 y del 3 al 11 servirán para estudiar el comportamiento en la segunda malla de las diferencias obtenidas al usar modelos de combustión diferentes y variaciones en la composición del aditivo.
- El caso 11 ayudará para usarlo como validación de los modelos de combustión.

En la Tabla 3.3 están expuestos los casos en los que o se ha usado un dosado distinto al estequiométrico o se ha usado un aditivo no inerte.

Las condiciones de contorno se pueden ver en la Tabla 3.4. Donde las Y representan las fracciones másicas de cada especie. Cabe destacar que estas son las condiciones de contorno normales para una mezcla estequiométrica. Habrá casos en los que se cambiará algún parámetro para conseguir mezclas con dosados diferentes al estequiométrico o para conseguir diferentes densidades finales.

Tabla 3. 4 Condiciones de contorno

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m3/s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	0.234	0.766	0	0	0.66	2.11E-04	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.65	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	4.93E-05	1.61E-04	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m3)
Características geométricas						1.11E-03	0.329
Área Interior (m2)	Área Exterior (m2)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

3.2 PATRONES DE FLUJO EN MEZCLA Y COMBUSTIÓN

Se estudiarán los patrones de flujo de los diferentes experimentos usando distinta malla, distinto factor de Swirl y comparando modelo con combustión y sin ella.

Para realizar un estudio del flujo dentro del quemador es más sencillo analizar los flujos en un plano que en una gráfica 3D. Como el quemador es axial simétrico cualquier plano que pase por el eje de simetría será representativo de todos los demás planos de simetría. De manera que se extrae los resultados obtenidos en el plano de simetría ZY (o también X=0) y se representan sobre una gráfica 2D.

3.2.1 CASOS DE MEZCLA

Se compararán el caso 1 con el caso 0, la única diferencia entre estos dos casos es la malla utilizada. Para comenzar evaluando ambas mallas. Se comienza con estos casos porque son los cuales en los que no hay combustión (solo se trabaja con la mezcla) y es necesario conocer estos resultados para poder entender posteriormente los resultados con combustión. Los contornos de velocidad del caso 1 son los que se encuentran en la Figura 3.3 y los del caso 0 en la Figura 3.4. Debido a que el quemador es simétrico sólo se dibujan las líneas de corriente en la mitad superior para que en la mitad inferior se puedan visualizar los contornos de manera correcta.

Se puede observar que en ambos casos aparecen zonas de recirculación. En ambos casos se forma un remolino de forma toroidal nada más mezclarse los dos chorros en la cámara. En el caso 0 el centro de este remolino se da un poco más alejado de la descarga. El centro en el caso 1 se encuentra a 20mm en el eje Z y en el caso 0 se encuentra 30 mm. En las gráficas inferiores a los contornos se ha extraído los datos a lo largo de un valor constante de Z representado por líneas verticales discontinuas en los contornos. Esto permite analizar los gradientes de velocidades en el interior de los remolinos. La coordenada Y representa el radio y así se puede comprobar que los perfiles de velocidades de los primeros remolinos son muy similares en los dos casos dándose gradientes de velocidad ligeramente mayores en el caso 1 pero velocidades negativas mínimas iguales en ambos casos.

La mayor diferencia entre ambos se da en el torbellino central que se da en el caso 1 a una altura de $Z=60\text{mm}$. Pero como se puede comprobar en la Figura 3.3 este torbellino es muy pequeño y no provoca a penas diferencias entre ambos casos como se puede comprobar en la Figura 3.5.

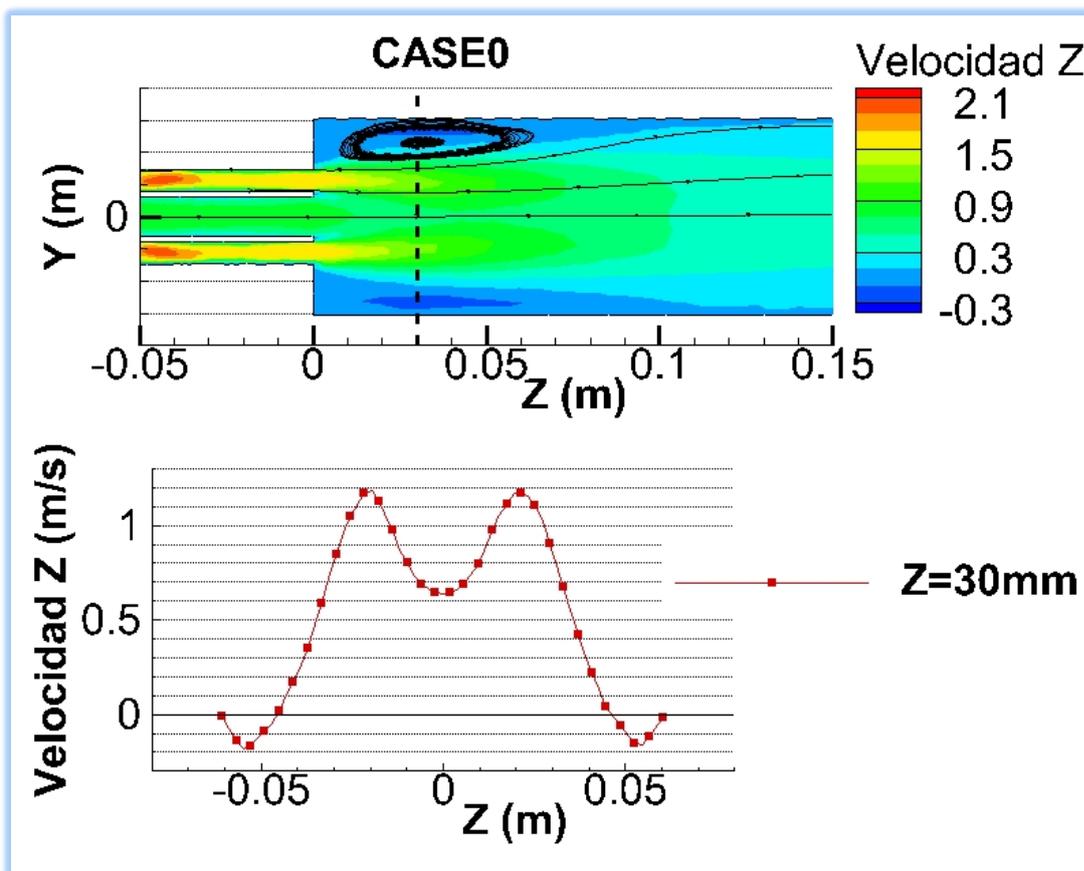


Figura 3. 3 a) Contornos de velocidad axial b) Velocidad axial frente al radio para el plano $Z=30\text{mm}$

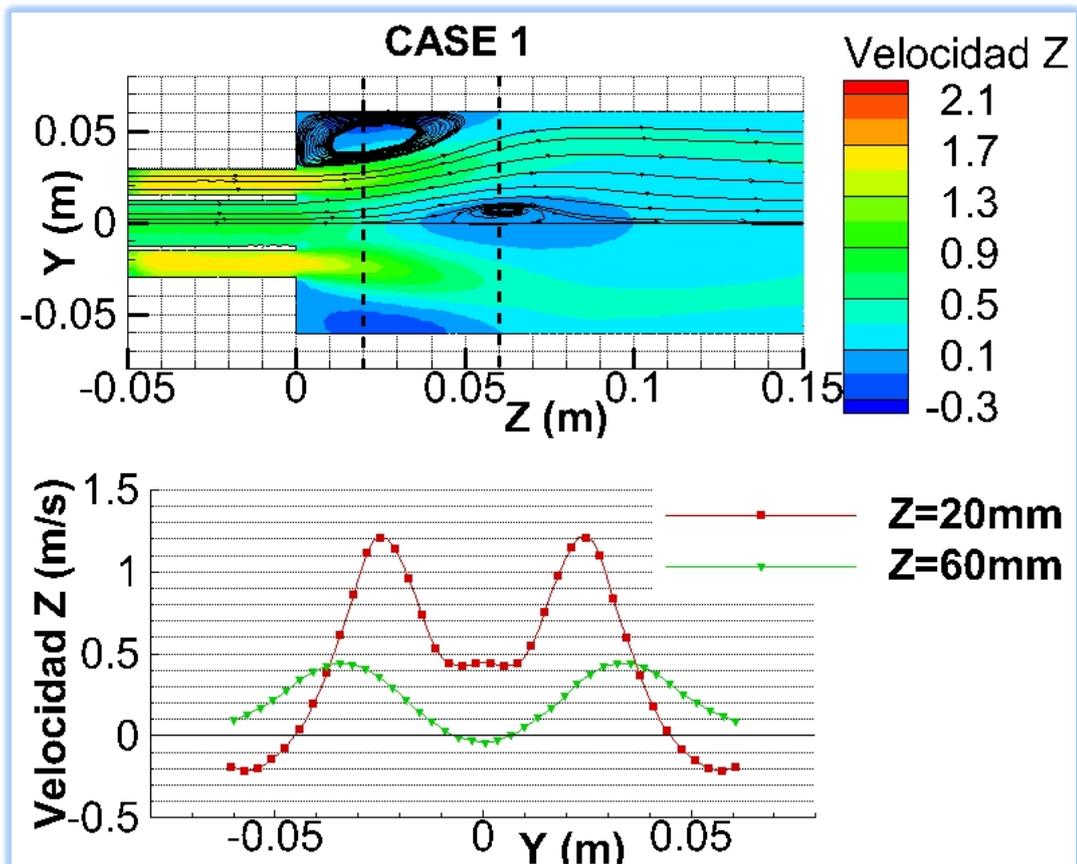


Figura 3. 5 a) Contornos de velocidad axial b) Velocidad axial frente al radio para los planos $Z=30\text{mm}$ y $Z=60\text{mm}$

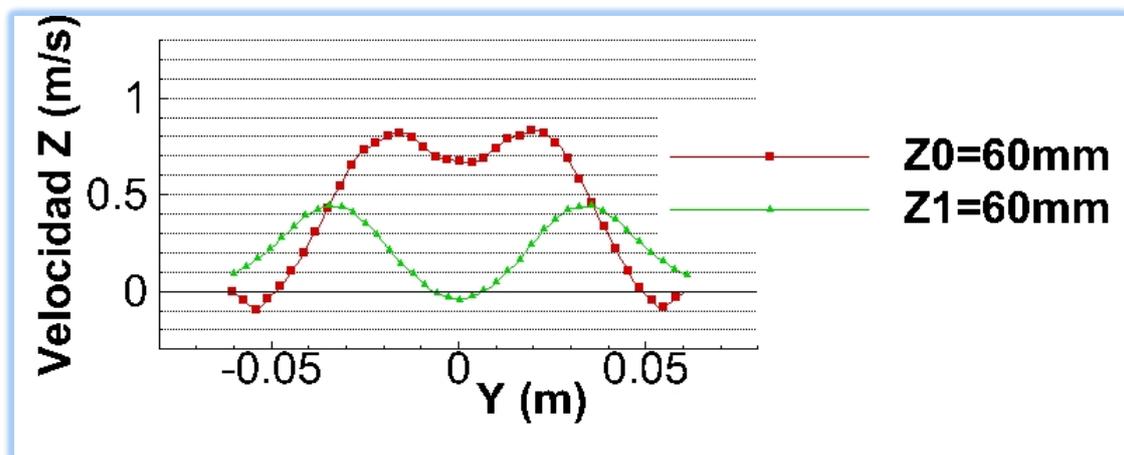


Figura 3. 4 Comparación de las velocidades axiales para $Z=60\text{mm}$ de los casos 0 y 1

La Figura 3.5 representa los perfiles de velocidad en los dos casos a la altura en la que se forma el segundo torbellino en el caso 1. Como se puede observar el perfil de velocidad en el caso 0 se ha homogeneizado y se parece más al perfil que tendría un fluido al pasar por un tubo con perfil redondo, sin embargo en el caso 1 todavía se producen gradientes de velocidad causados por las inestabilidades creadas por el

generador de Swirl. También cabe destacar que los remolinos en la periferia (de forma toroidal) a esta altura solo se dan en el caso 0.

3.2.2 CASOS CON REACCIÓN EDC

Para continuar el análisis de flujo en las dos mallas diferentes se activarán las reacciones químicas. Se usará solo un modelo de combustión en cada caso para no complicar demasiado los resultados, en este caso se usará el EDC. El aditivo a usar en este caso será el del tipo 3, en consecuencia los casos que se compararán serán el caso 2.1 con el caso 3 que están representados en la Figura 3.6 y Figura 3.7 respectivamente.

Al igual que en los casos de mezcla, los perfiles en los casos de la malla de quemador completo los perfiles se suavizan antes. Como se puede ver en la Figura 3.7 el perfil de velocidad en Z=100mm tiene unos gradientes de velocidad muy suaves mientras que en el caso 2.1 todavía sufre grandes gradientes provocados por el torbellino que todavía tiene efecto hasta Z=70mm como se observa en la Figura 3.6. Los perfiles de velocidad con combustión son muy similares a los obtenidos con la mezcla, de manera que para el siguiente estudio se utilizarán modelos con combustión que darán resultados más útiles ya que en la realidad nunca se podría llevar a cabo un experimento sin combustión en estas condiciones.

Para hacer el estudio de los flujos conviene utilizar la malla de cuarto de quemador ya que se ve que es más sensible y se visualiza el torbellino central, en cambio para estudios con combustión como se realizarán en los capítulos posteriores se puede utilizar la malla de quemador completo ya que la de cuarto de quemador da problemas de periodicidad.

3.2.2.1 Influencia del factor de Swirl

Como modelo de turbulencia se usará K- ϵ RNG con la especificación de Swirl Dominated Flow dado que es el modelo de turbulencia que mejor se adapta a este tipo de flujos [Pérez, 2016].

Falta especificar el factor de Swirl, que representa una constante que determina la viscosidad turbulenta según la Ec 3.1

$$\mu_t = \mu_{t0} f\left(\alpha_s, \Omega, \frac{k}{\epsilon}\right) \quad \text{Ec 3.1}$$

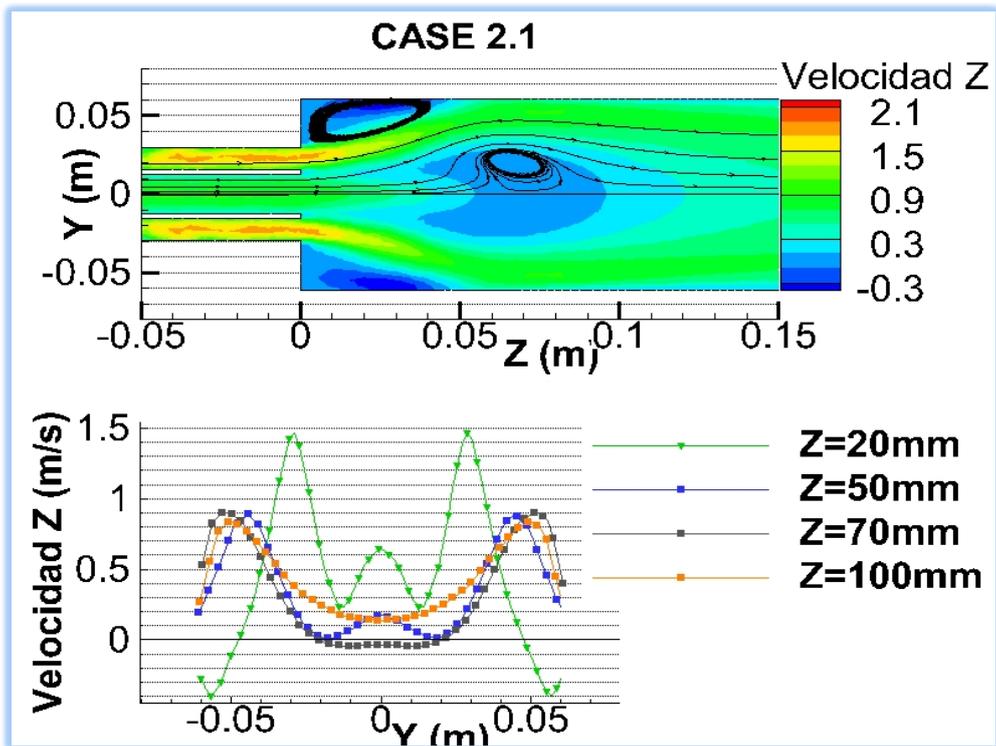


Figura 3. 6 a) Contornos de velocidad axial b) Velocidad axial en función de la coordenada radial para diferentes alturas del eje Z

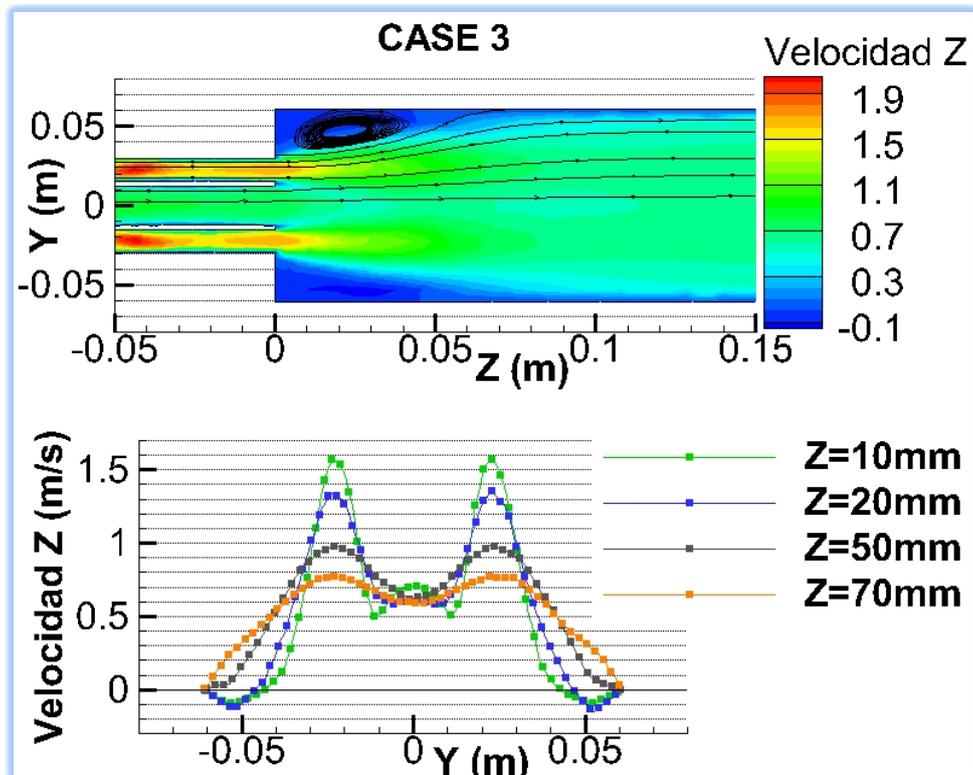


Figura 3. 7 a) Contornos de velocidad axial b) Velocidad axial en función de la coordenada radial para diferentes alturas del eje Z

Donde en la Ec 3.1:

μ_{t0} representa la viscosidad turbulenta calculada sin la modificación de Swirl.

Ω representa un número de Swirl característico calculado por Fluent.

k representa la energía cinética turbulenta.

ε representa la disipación de energía turbulenta.

α_s representa el factor de Swirl que tendrá que ser mayor cuanto más dominado por el Swirl sea el flujo.

Para saber en qué intervalo de valores para el factor de Swirl se puede trabajar es necesario saber como de dominado por el Swirl está el flujo y para ello es necesario calcular el número de Swirl a la entrada de la cámara de combustión.

Como se ha mencionado en el capítulo anterior:

$$S = \frac{\int \rho v_{\theta} v_z 2\pi r^2 dr}{\frac{d}{2} \int \rho v_z^2 2\pi r dr} \quad \text{Ec 3. 2}$$

Para poder calcular el número de Swirl (S) será necesario conocer los valores del flujo a la entrada a la cámara de combustión, que en esa zona como todavía no se ha mezclado el combustible con el comburente las variables no serán diferentes en los distintos casos ya que la combustión aguas abajo no afecta a la entrada. Así que se usará el caso 0 y el valor de las incógnitas se puede ver en la Figura 3.8.

De la Figura 3.8 se puede observar que:

- Ambas variables se mantienen constantes en dos zonas, en la periferia y en el centro, esto se debe a la distribución de la mezcla en una tobera interior y una exterior.
- La forma de las gráficas es simétrica centrada en $Y=0$ dado que el quemador es axial simétrico.
- El valor de la velocidad tangencial en el intervalo $-0,03m \approx Y \approx 0,03m$ es nulo. Esto se debe a que el generador de Swirl se encuentra en la tobera exterior de manera que el flujo proveniente de la tobera interior tiene solo componente axial.
- Los valores de ambas variables se mantienen constantes en las zonas que respectan a cada tobera exceptuando la velocidad cercana a las paredes debido al rozamiento que las paredes causan sobre el flujo.

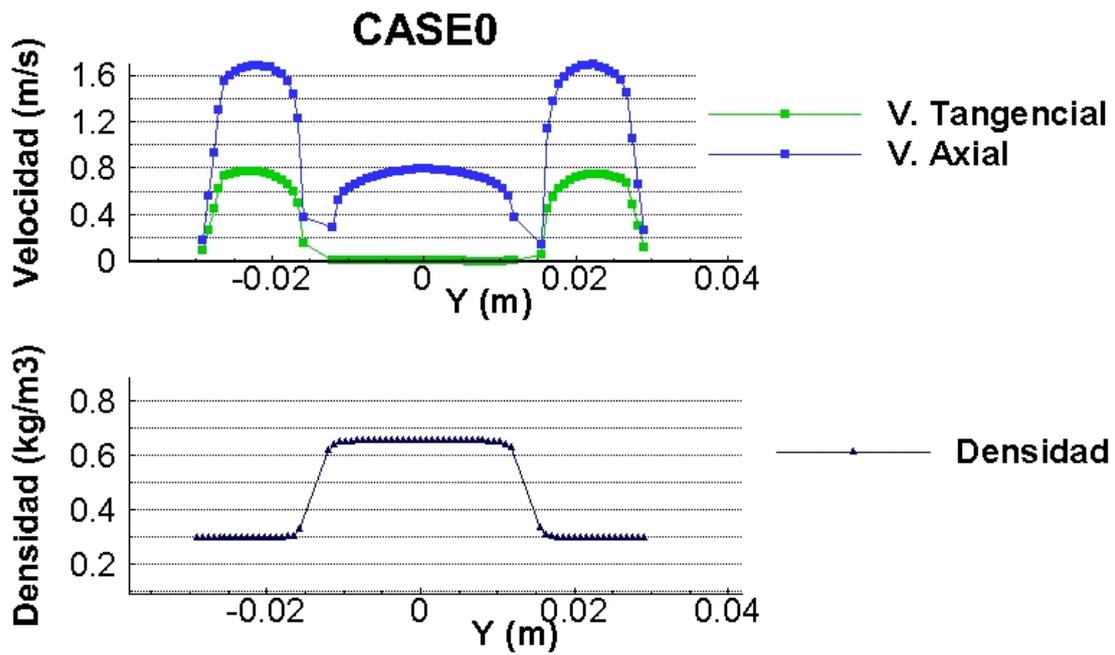


Figura 3. 8 a) Valores de las velocidades axial y tangencial en el plano de descarga b) Valores de la densidad en el plano de descarga

Como se pueden considerar ambas variables constantes a lo largo de la tobera exterior se podrá sacar su valor de la integral y partiendo de la Ecuación 3.2 el número de Swirl quedará:

$$S = \frac{\rho v_{\theta} v_z 2\pi \int_{r_1}^{r_2} r^2 dr}{\frac{d}{2} \rho v_z^2 2\pi \int_{r_1}^{r_2} r dr} = 0,48$$

Como se puede observar el número de Swirl es una función dependiente de la densidad, del radio y de las velocidades axial y tangencial: $S = f(\rho, v_{\theta}, v_z, r)$. Se puede ver representado en la Figura 3.9.

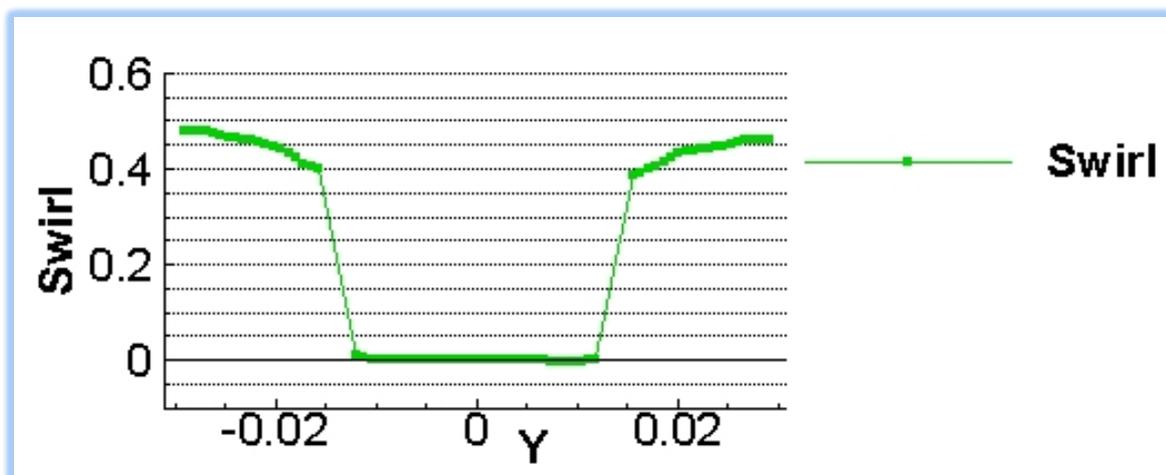


Figura 3. 9 Representación del número de Swirl en función de la coordenada radial

El valor del número de Swirl se aproxima más al resultado teórico obtenido cuanto más cerca de los extremos se calcule, esto se da debido a que los valores introducidos en la fórmula son los valores máximos de las velocidades que son los que se mantienen constantes durante un espacio mayor.

Como el número de Swirl no es alto, es decir la relación del momento angular con el momento lineal es pequeña no se usarán factores de Swirl altos, es decir se comparará el factor que se usa por defecto (0,07) con uno más bajo usado en trabajos anteriores de valor 0,001. Cabe destacar que 0,48 corresponde con el número de Swirl del flujo de la tobera exterior, al mezclarse con el flujo de combustible y aditivo el ratio de momento angular con momento lineal disminuirá notablemente. No es necesario el cálculo del número de Swirl medio dado que no es de interés, interesa el número de Swirl del flujo exterior para conocer la influencia de los álabes fijos.

En la Figura 3.10 se puede observar la diferencia en el caso 0 cuando se usa un factor de Swirl de 0,001 frente a uno de 0,07, es decir se comparan el caso 1.3 con el caso 1. Se puede observar que las diferencias son apenas apreciables en los contornos de velocidad. Una vez estabilizado el flujo, es decir para $Z > 0,1\text{m}$ ambas velocidades son ligeramente mayores para el caso 1 y se producen menos gradientes, también para el caso 1. Con los resultados obtenidos se puede afirmar que las diferencias son mínimas y que la variación del factor de Swirl no influirá en el resultado. De ahora en adelante se usará como factor de Swirl 0,001 ya que es el usado en trabajos anteriores [Urueña, 2014].

4 CAPÍTULO

ANÁLISIS Y VALIDACIÓN DE LOS MODELOS DE COMBUSTIÓN

4.1 PRESENTACIÓN

En este capítulo se estudiarán las diferencias obtenidas al usar diferentes modelos de combustión. Generalmente se compararán el modelo Eddy-Dissipation-Concept (EDC) con el modelo probabilístico Probability Density Function (PDF). También se utilizará el modelo Eddy-Dissipation únicamente en el caso 11.

El quemador se considera que está completamente aislado, es decir, no se cede calor al exterior. De esta manera todo el calor liberado en la combustión será transferido a los productos como aumento de temperatura ya que la presión se mantiene constante en todo momento (combustión adiabática). Las variables termodinámicas que se mantienen constantes durante el proceso de combustión son la presión que no varía respecto de la presión ambiental y el calor cedido al exterior, que se mantiene nulo durante todo el proceso.

En este capítulo se trabajará únicamente con los casos expuestos en la Tabla 4.1.

Tabla 4. 1 Casos expuestos en el Capítulo 4

Caso	Aditivo	Modelo de Combustión	Swirl Factor	Malla
Caso 0	Add 2	Mezcla	0.001	Quemador completo
Caso 3	Add 2	EDC		
Caso 4	Add 1			
Caso 5	He			
Caso 7	Add 2	PDF		
Caso 8	Add 1			
Caso 9	He			
Caso 11	Add 2	ED		
Caso_RICA.100.PDF	CH ₄	PDF		
Caso_RICA.100.EDC		EDC		

Tabla 4. 2 Condiciones de contorno para los casos expuestos en la Tabla 4.1

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m ³ /s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	0.234	0.766	0	0	0.66	2.11E-04	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.65	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	4.93E-05	1.61E-04	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m ³)
Características geométricas						1.11E-03	0.329
Área Interior (m ²)	Área Exterior (m ²)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

4.2 EDC (EDDY-DISSIPATION-CONCEPT)

El primer modelo de combustión que se analizará será el EDC. Como se explicó en el capítulo 1, este modelo es una mejora del Eddy-Dissipation (ED) con la principal peculiaridad de que aquí se tiene en cuenta la relación entre cinética química y química turbulenta, donde se incluyen las tasas de reacción. Tiene un coste computacional muy alto que crece rápidamente con el número de especies a tratar. Debido a esto, en este trabajo se usa el mecanismo simplificado de combustión del metano de dos reacciones. Sigue siendo más exacto que el ED pero no se adecúa al 100% a la realidad ya que hay cientos de reacciones en la combustión del metano.

Para este apartado se analizarán los casos 3, 4 y 5 (expuestos en la Tabla 4.1) entre los cuales solo varía el aditivo usado. Estos casos tienen las mismas condiciones de contorno que todos los analizados anteriormente y que están expuestas en la Tabla 4.2.

En la Figura 4.1 se han expuesto los contornos de densidad de los tres casos simulados con el modelo de combustión EDC. Es importante recordar que el caso 3 está simulado con el segundo tipo de aditivo, es decir, con una sustancia con las mismas propiedades que el metano. El caso 4 está simulado con el primer tipo de aditivo y el caso 5 con helio como aditivo. El aditivo del caso 4, como se explicó en el capítulo 3, consiste en helio multiplicando su masa por cuatro (peso molecular de 16 g/mol) y por consiguiente su densidad también. Como se puede observar en la Figura 4.1 esta

modificación ha surtido efecto y se ha conseguido una densidad muy similar en el caso del primer tipo de aditivo y el segundo. En cambio, como era de esperar en el caso 5 la densidad es mucho más baja a lo largo de todo el quemador. En la tobera exterior la densidad es la misma ya que en todos los casos se inyecta aire a 1200 K, pero en la tobera interior se inyecta helio (normal, sin modificar) que tiene una densidad de 0,168 kg/m³, que frente a la del metano que es 0,655 kg/m³ es una diferencia importante que afecta a las densidades a lo largo de todo el quemador.

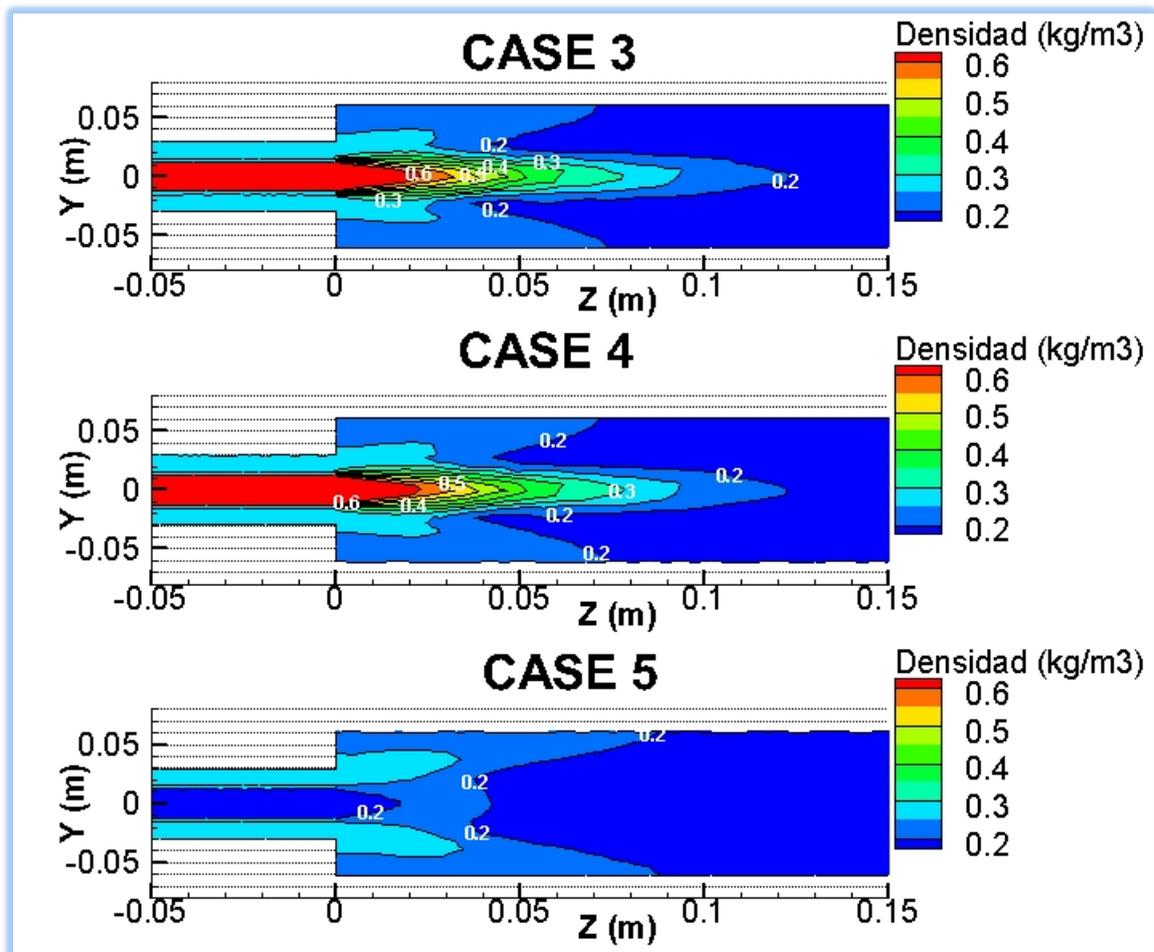


Figura 4. 1 Contornos de densidad de los casos reactivos simulados con EDC

El análisis del calor específico a presión constante (es el analizado en este trabajo ya que el calor específico a volumen constante no es de interés porque todo el proceso a lo largo del quemador se realiza a presión constante) es importante para comprender el futuro comportamiento de la mezcla. Como se observa en la Figura 4.2 el calor específico en el caso 3 es considerablemente más bajo que en los casos 4 y 5. Esto se debe a que en el caso 3 se ha usado un aditivo con las características del metano, es decir el calor específico de la mezcla que circula por la tobera interior es igual al calor específico del metano que en estas condiciones es de 2200 kJ/kgK. En los casos 4 y 5

como se ha usado como aditivo, y el aditivo es un 76,6% de la mezcla (Tabla 3.3) el calor específico de la mezcla en estos casos se aproximará considerablemente al calor específico del helio que en estas condiciones es de 5100 kJ/kgK.

En la Figura 4.3 se pueden analizar las densidades a lo largo de unos planos transversales que, al ser el quemador simétrico, con una gráfica 2D es suficiente para definir toda la geometría. En el plano $Z=0$ se observan las densidades en la inyección de combustible y comburente en la cámara de combustión; como era de esperar las densidades a lo largo de la geometría que abarca la tobera interior son las mismas que la densidad del combustible en cada caso y lo mismo ocurre con la tobera exterior y el comburente.

En el plano $Z=50\text{mm}$ se observa que los perfiles se van homogenizando, dado que se han mezclado y se ha formado la mezcla, pero como se puede ver con facilidad que la mezcla no es completa. Sigue habiendo una mayor densidad en la zona central en los casos 3 y 4 y una menor densidad en el caso 5. También se observa que la densidad en las zonas cercanas a las paredes se mantiene prácticamente constante en ambos planos. Esto informa de que el combustible no ha llegado a las paredes y no se ha formado mezcla ahí dado que la densidad es la del aire. El mismo fenómeno se observa en las gráficas de la derecha con el calor específico. Es de esperar que suceda lo mismo con todas las propiedades ya que prevalecen por el interior la mezcla de combustible y por el exterior la mezcla de comburente. Es importante resaltar que estos resultados son la representación de los 50mm iniciales, en los contornos se ve cómo se va homogenizando la mezcla.

El aditivo es una sustancia que no reacciona, así que la producción o destrucción neta de aditivo será siempre nula. Esta característica la convierte en la sustancia ideal para analizar la calidad de la mezcla. Los contornos de fracción másica de los aditivos están representados en la Figura 4.4 donde se observan los resultados a lo largo de los 150mm iniciales del quemador. Se comprueba el análisis hecho en los contornos de densidad y calor específico, la mezcla no se forma en los instantes iniciales especialmente en las zonas exteriores e interiores. Esto es de esperar ya que la mezcla se produce en las zonas de mayor esfuerzo cortante [Roback, 1983] y ésta está entre la ORZ y la zona central ya que la zona central tiene menor velocidad que la zona exterior y también tiene menor velocidad tangencial (nula al principio) debido a que no hay generador de Swirl en la tobera interior. Este gradiente de velocidades representado en la Figura 4.5 (esta figura no lleva título de ningún caso concreto porque es representativa de todos los casos analizados con las condiciones de contorno en la Tabla 4.2) es el que causa zonas con esfuerzos cortantes máximos y por consiguientes zonas donde se produce la mezcla.

Cabe destacar las notables diferencias en los contornos de la Figura 4.5 entre los casos 3 y 4 con el caso 5. En el caso 5 el aditivo se diluye mucho más rápidamente y las concentraciones son menores a lo largo de todo el quemador. En la Tabla 4.3 hay una relación entre la rapidez de la disolución del aditivo con el número de Prandtl.

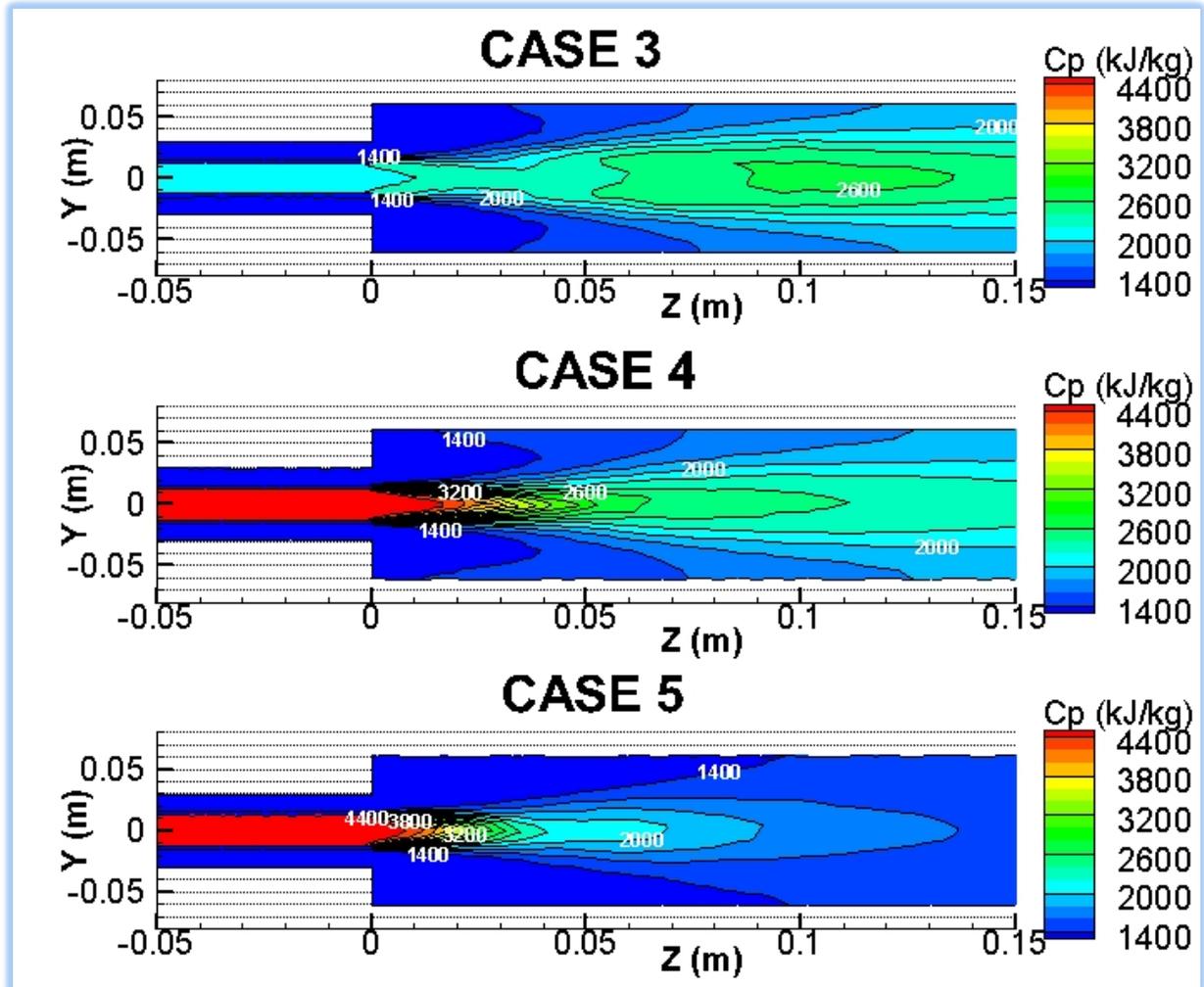


Figura 4. 2 Contornos de calor específico a presión constante de los casos simulados con EDC

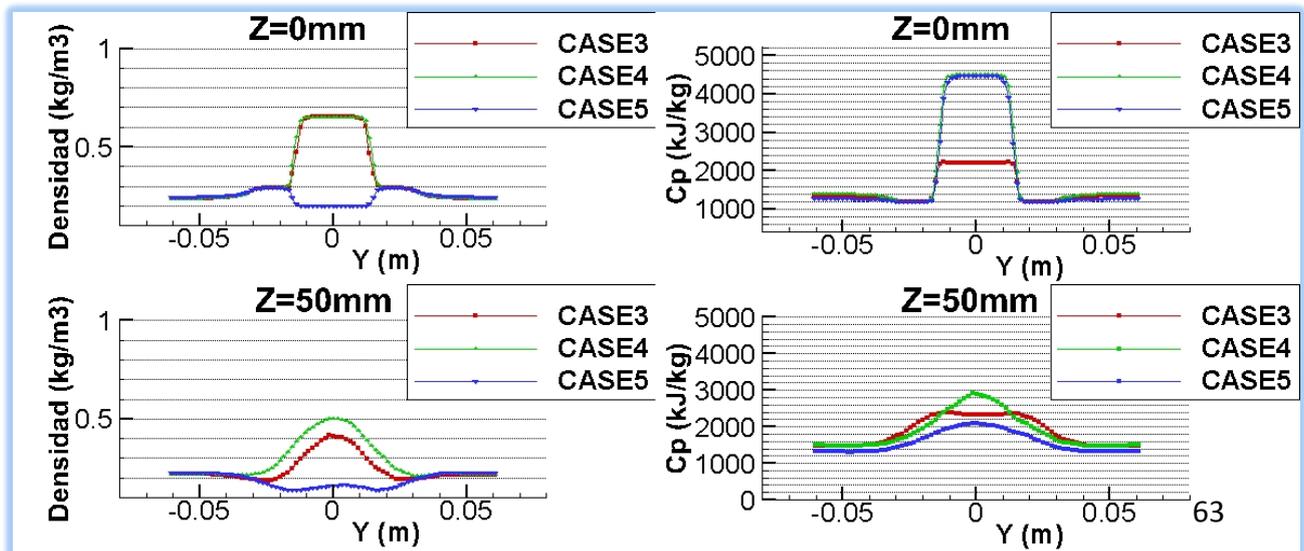


Figura 4.3 Gráficas de la densidad y el calor específico en función de la coordenada radial para los casos simulados con EDC

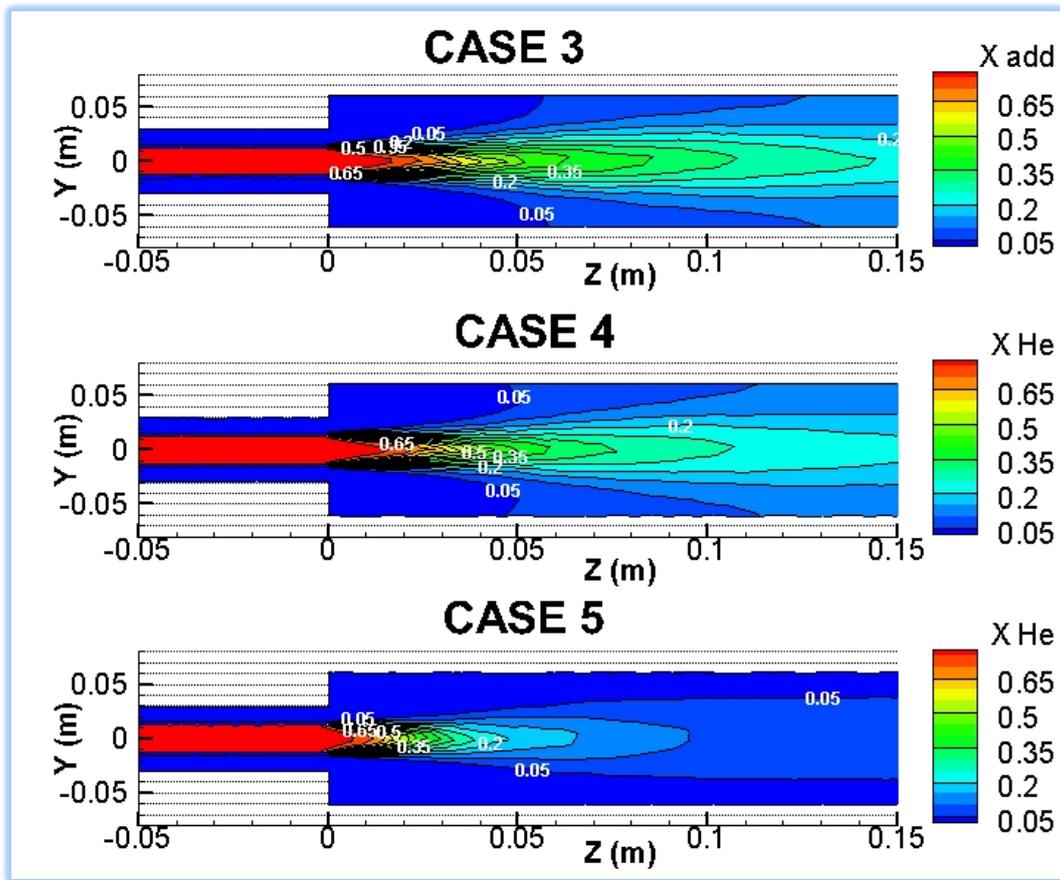


Figura 4. 4 Contornos de fracción máscica de aditivo de los casos simulados con EDC

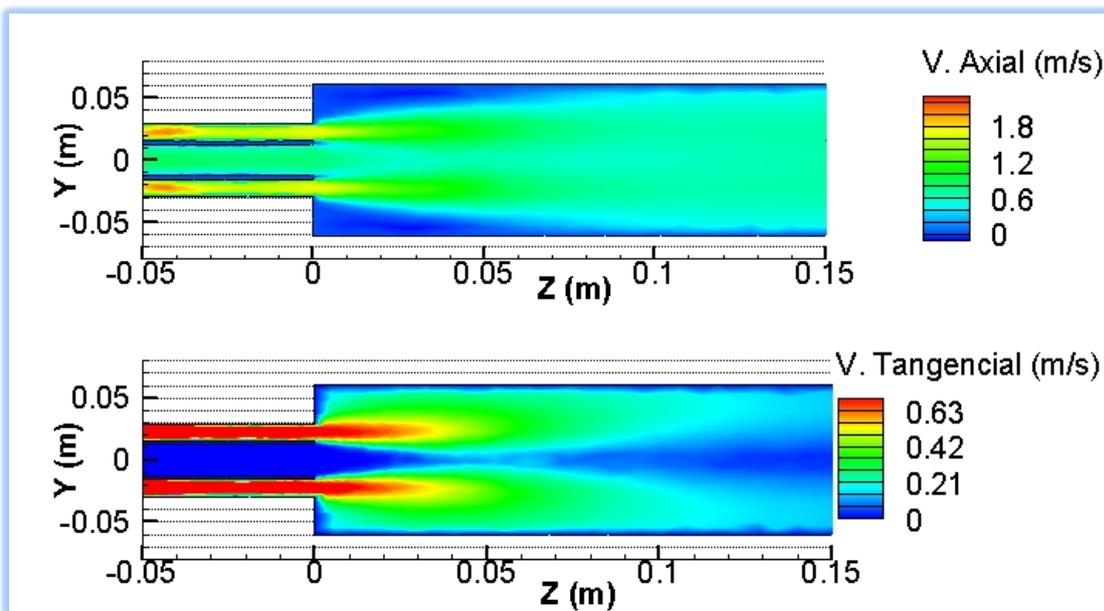


Figura 4. 5 Contornos de velocidad Tangencial de los casos simulados con EDC

Tabla 4. 3 Propiedades de los aditivos

Aditivo	ρ (kg/m ³)	μ (kg/ms)	K (W/mK)	C _p (kJ/Kkg)	Prandtl	Caso
Add 2	0.656	1.99E-05	0.0332	2200	1.32	3
Add 1	2.624	1.12E-05	0.152	5300	0.39	4
He	0.1785	1.12E-05	0.152	5300	0.39	5

El aditivo que proporciona una mejor mezcla es el de tipo 1 (utilizado en el caso 3) y el helio por tener un número de Prandtl considerablemente menor al aditivo de tipo 1. Ambos aditivos se mezclan con igual facilidad debido a que ambos están formados por helio. Cuando se utiliza helio las concentraciones másicas de aditivo a lo largo del quemador son menores. Esto no debe llevar a confusión ya que el flujo másico de aditivo en este caso (caso 5) es considerablemente menor que en los otros dos casos. Este fenómeno se estudiará en el siguiente apartado

4.3 PDF (PROBABILITY DENSITY FUNCTION)

4.3.1 ESTUDIO CINEMÁTICO DEL FLUJO (CASOS 7 Y 8)

Ahora se analizarán los casos 7 y 8. Para el modelo de combustión PDF, el cual, como se explicó en el capítulo 2 es un modelo de combustión probabilístico que tiene un coste computacional mucho más bajo que el EDC. Por ejemplo, el caso 3 y el 7 son equivalentes, es decir, son el mismo modelo con las mismas especies pero uno simulado con EDC y el otro con PDF. El caso 3 necesitó 4 horas hasta que se estabilizó (aproximadamente 1000 iteraciones) y el caso 7 unos 40 minutos, es decir, 6 veces menos. Los dos casos fueron simulados en el mismo ordenador (los tiempos de computación aproximados están expuestos en la Tabla 4.7).

A continuación se muestran los contornos de velocidad, densidad, temperatura y concentración de aditivo para analizar la influencia que tienen los tres distintos aditivos en el resultado final.

En los contornos de velocidad que se ven en la Figura 4.3 se puede ver que en los dos casos la mezcla evoluciona de manera parecida. En ningún caso se forma IRZ (zona de recirculación central) como era de esperar ya que tampoco había en el caso no reactivo [Parra et al., 2015]. La ORZ es muy útil ya que ayuda a mejorar el mecanismo de mezclado ya que la mezcla sucede entre las zonas de recirculación ya que es donde más esfuerzo cortante hay [Roback, 1983].

La ORZ (zona de recirculación exterior) se forma a la misma altura en el eje Z, aproximadamente a 25 mm del inicio de la cámara de combustión. Posterior a esta recirculación el fluido evoluciona de manera similar en los tres casos. Debido a que los contornos muestran los resultados de forma cualitativa, y en estos casos concretos los contornos de velocidades son muy similares en la Figura 4.4 se han representado las gráficas de las velocidades a diferentes alturas en el eje Z para poder analizar los resultados de forma cuantitativa.

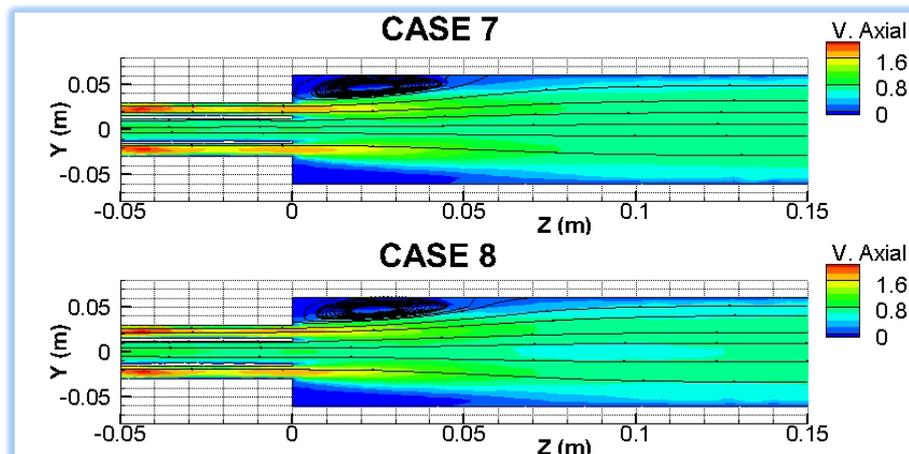


Figura 4. 6 Contornos de velocidad axial y líneas de corriente de los casos 7 y 8.

En la figura 4.7 se han representado los resultados de la velocidad a lo largo de distintas coordenadas del eje Z. Como la geometría es axial simétrica con representar la velocidad frente a la coordenada radial (en este caso la coordenada Y) la propiedad a representar queda completamente definida. La ORZ se forma ya que el ratio de expansión es menor que 3 [Parra et al., 2015]

Las velocidades a lo largo de los 150 mm iniciales de quemador son muy similares para los dos casos (ver Figuras 4.6 y 4.7). Según se va avanzando en el eje Z se van separando ligeramente los perfiles pero a efectos prácticos se pueden considerar iguales. Esto es acorde a lo esperado ya que ambos aditivos tienen misma masa y densidad.

También se observa que la zona de recirculación exterior es igual en los dos casos, dándose la geometría observada en los contornos y una magnitud de velocidad igual en los tres casos. En $Z=50$ mm se observa que todavía la velocidad axial en los extremos del quemador es ligeramente negativa, se puede deducir que es el extremo del remolino, así que la ORZ abarca desde el inicio de la cámara de combustión hasta aproximadamente $Z=50$ mm.

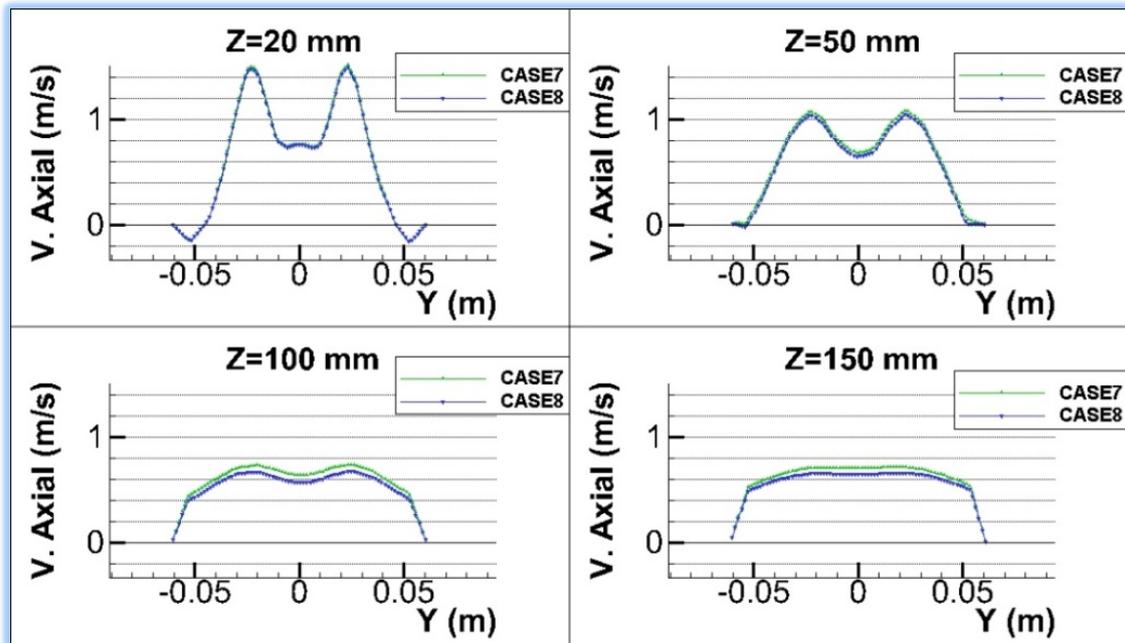


Figura 4. 7 Gráficas de velocidad axial en función de la coordenada radial para los casos 7 y 8.

En la última gráfica (Z=150mm) los perfiles de velocidad se han estabilizado y ya se parecen al perfil de velocidad típico en una tubería redonda con flujo turbulento (Figura 4.8). En la Figura 4.8 se observan dos perfiles de velocidad típicos que se dan en tuberías de perfil circular. El primero corresponde a un flujo laminar y el segundo a un flujo turbulento. La diferencia fundamental entre estos dos tipos de movimientos fluidos es que en el flujo turbulento predominan las fuerzas convectivas sobre las viscosas y en el laminar al revés. Si la velocidad del fluido se hace suficientemente grande la viscosidad del fluido comienza a ser despreciable en el movimiento y el fluido se hace muy sensible a cualquier perturbación, y estas perturbaciones se amplifican rápidamente; el flujo se hace entonces muy irregular y pierde su carácter estacionario y unidireccional y toma un carácter aleatorio [Crespo, 2006].

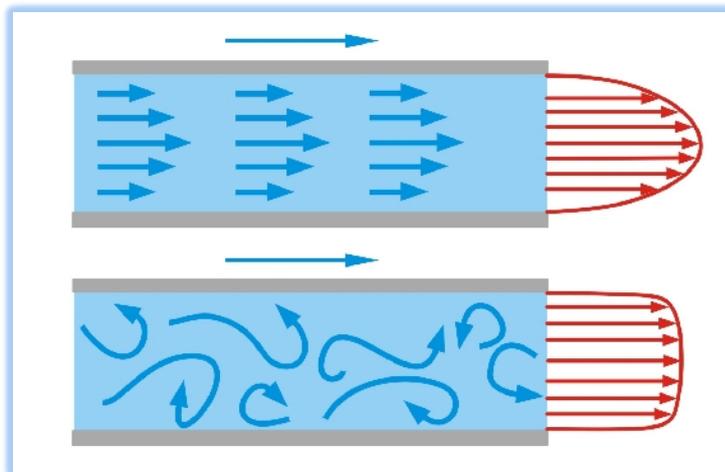


Figura 4. 8 a) Perfil de velocidad de un flujo laminar b) Perfil de velocidad de un flujo turbulento

En el caso estudiado ahora, dadas las condiciones en las que evoluciona el fluido el perfil debe asemejarse al segundo tipo. En la última gráfica de la Figura 4.7 se puede ver que el perfil va evolucionando, o llega a ser igual, al perfil de velocidad en un flujo turbulento.

En la Figura 4.9 están representados los contornos de densidad de los dos casos en los 150mm iniciales de quemador. Se puede observar que estos contornos tienen forma parecida pero se desarrollan de manera distinta siendo las densidades ligeramente menores en el caso 8. Estos resultados pueden resultar cuestionables a primera vista debido a que en ambos casos se usan las mismas condiciones de contorno y las mismas especies, salvo el aditivo. Las diferencias entre ambos aditivos (calor específico, entalpía, etc) afectan a los perfiles de temperatura provocando cambios de densidad. Este fenómeno será explicado con mayor profundidad en el apartado de análisis de temperaturas.

En la Figura 4.10 se comparan las densidades de la mezcla en los tres casos a diferentes alturas del eje Z. Se observa que en ambos, aunque los perfiles tengan diferentes valores, la forma es similar, dándose una densidad máxima en el centro decreciente según se acerca a la periferia. Esto confirma la validez de los resultados dado que en las paredes tiene la mayor influencia el comburente como se ha explicado en el apartado anterior. Ambos comburentes son exactamente iguales por lo tanto las zonas de mayor similitud deben ser las zonas cercanas a las paredes.

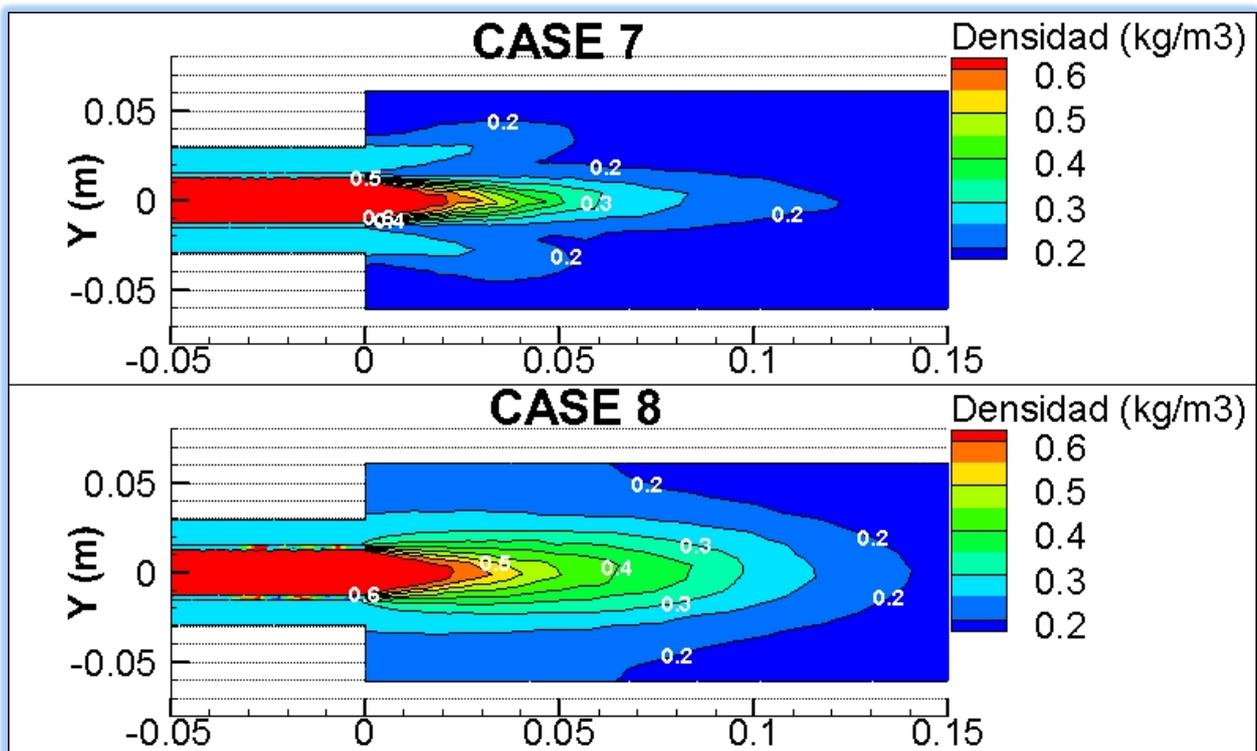


Figura 4. 9 Contornos de densidad de los casos 7 y 8

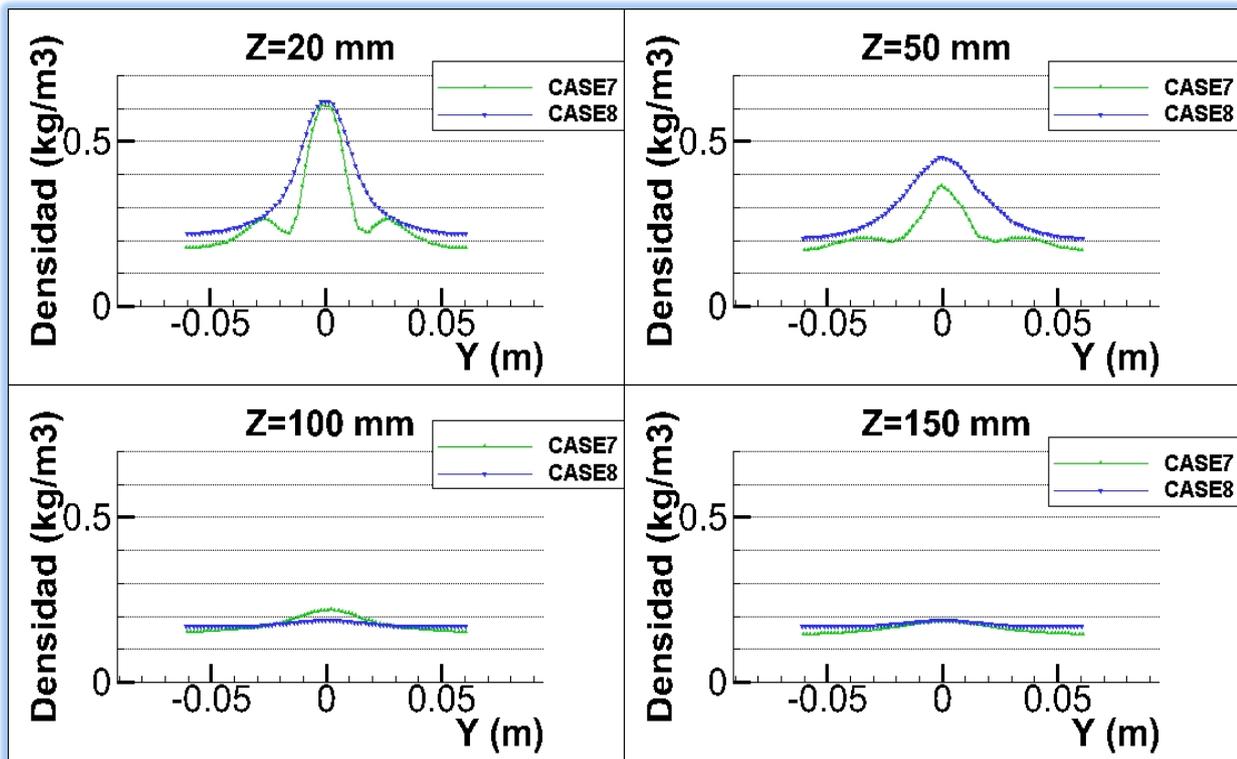


Figura 4. 10 Gráficas de densidad en función de la coordenada radial para los casos 7 y 8 en cuatro planos Z=constante

En la Figura 4.11 se ha estudiado el flujo másico, también denominado como gasto, que circula por distintos planos perpendiculares al eje de simetría del quemador. Los planos se han situado a lo largo del eje Z en las posiciones, $Z_1=50$ mm, $Z_2=500$ mm, $Z_3=900$ mm. Se pueden identificar como las rebanadas en rojo. Los tres planos están situados después de la inyección del combustible y comburente en la cámara de combustión. El gasto representa la cantidad de masa que fluye a través de un área en un intervalo de tiempo, a la hora de calcularlo es necesario que el software realice la integral mostrada a continuación:

$$G = \iint \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \iint \rho v_z dA \quad \text{Ec 4. 1}$$

El producto escalar es igual a la velocidad en el eje z ya que el producto escalar representa la proyección de la velocidad sobre el vector normal al diferencial de área. Como en todos los casos se han cogido planos del tipo Z=constante. Como se puede ver en la Figura 4.12, esta proyección resultará ser la componente axial de la velocidad. Esta proyección vectorial está representada en la Figura 4.12 donde el vector rojo representa el vector normal al plano de corte, el vector naranja la velocidad, el vector azul la componente axial de la velocidad el plano XY el plano de corte.

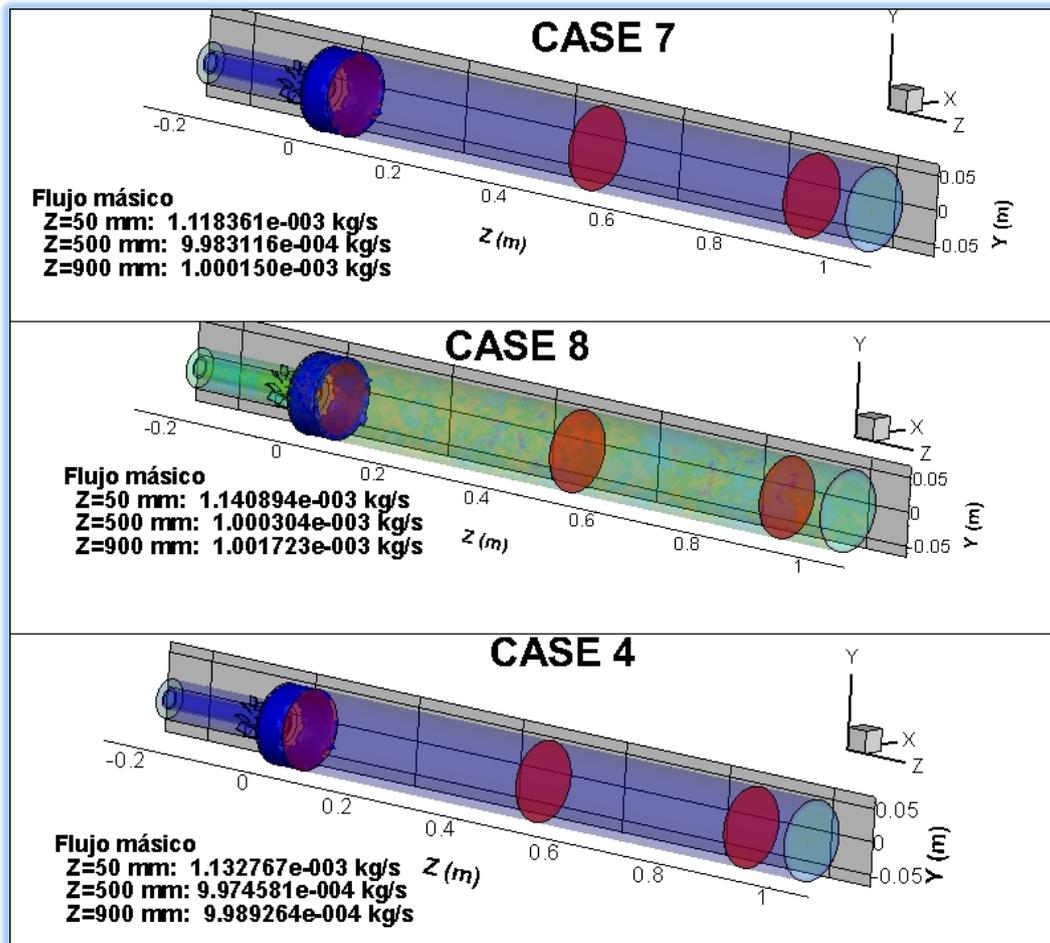


Figura 4. 11 Flujos másicos a través de tres planos Z=constante para tres casos diferentes

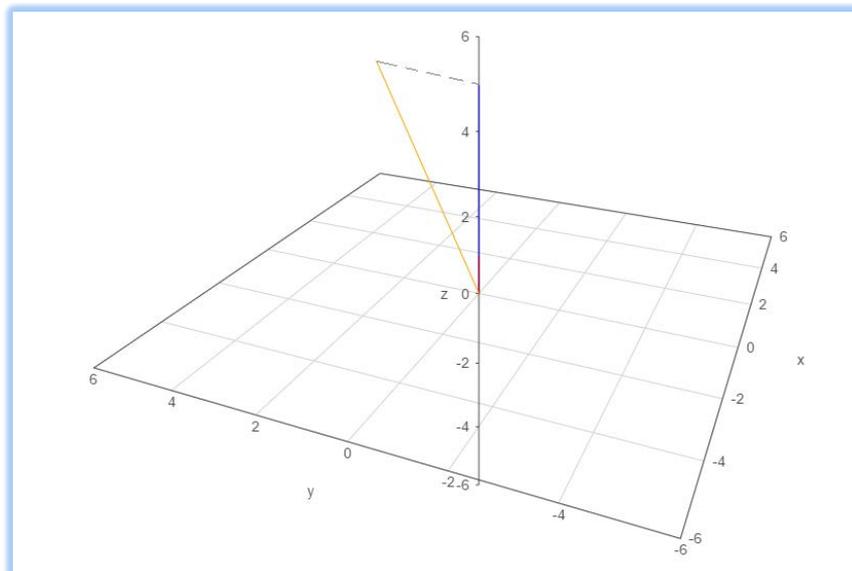


Figura 4. 12 Representación de la proyección del vector velocidad sobre la normal del plano Z=constante

En todos los casos se da un flujo de aproximadamente 1 g/s que es muy cercano al calculado en la Tabla 4.2 donde se exponían las condiciones de contorno, con un error ligeramente menor al 10% en el caso 7 y en el caso 8. Es un fallo de cálculo suficientemente grande como para poder suponer que no ha sido producido por falta de convergencia del flujo másico o por error del cálculo numérico, por lo tanto el error debe estar en alguna de las variables dentro de la integral.

Para estudiar las variables densidad y velocidad se estudiarán dos zonas del quemador. La entrada donde los valores son conocidos ya que son las condiciones de contorno del experimento y una zona donde el flujo, y por tanto los perfiles, ya se hayan estabilizado. Cuanto más alejado de la zona de combustión y del generador de swirl más estabilizado estará el flujo, así que se escogerá un plano en Z=900mm. Las variables. Estos perfiles están representados en la Figura 4.12.

Para realizar la integral manualmente y compararla con la hecha por el software de post-proceso se parte de la ecuación 4.1 y como la geometría está discretizada en celdas (volúmenes finitos) la integral se podrá sustituir por un sumatorio:

$$G = \iint \rho v_z dA = \sum_{i=1}^n \rho_i v_{zi} A_i \quad \text{Ec 4. 2}$$

Donde i representa el número de celda en el que se realiza la operación y n el número de celdas que corta el plano.

$$(\rho v_z)_{media} = \frac{\iint \rho v_z dA}{\iint dA} = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i v_{zi} A_i}{\sum_{i=1}^n A_i} \quad \text{Ec 4. 3}$$

La variable $(\rho v_z)_{media}$ representa el momento lineal medio del flujo por unidad de volumen. Esta variable será la que se utilizará para realizar la integral manualmente.

$$G = \iint \rho v_z dA = \sum_{i=1}^n \rho_i v_{zi} A_i = (\rho v_z)_{media} A_T \quad \text{Ec 4. 4}$$

Donde A_T representa la suma de las superficies resultantes del plano al cortar las celdas, es decir, el área transversal el quemador.

Como se puede visualizar en la Figura 4.13 el momento lineal no es constante a lo largo de todo el plano de corte. Como era de esperar el momento lineal disminuye cuando entra en contacto con las paredes ya que estas ralentizan el fluido. El momento lineal cuando $r > 0.03\text{m}$ es nulo ya que es la zona donde ya se inyecta la

mezcla y como se ve en la Figura 4.14 la velocidad axial es nula, y debe serlo para respetar la ecuación de continuidad.

En las gráficas representadas en la Figura 4.14 se puede observar que la densidad no está influenciada por las paredes como era de esperar ya que al ser paredes adiabáticas no provocan un cambio de temperatura en la mezcla y por ello la densidad se mantiene constante. También se observa que la mezcla en Z=900mm es completamente homogénea, no habiendo ninguna fluctuación en la densidad a lo largo del radio. Por ello se deduce que la variación que se produce en el momento lineal (segunda gráfica de la Figura 4.13) es únicamente provocada por la variación en la velocidad axial. Esto se confirma cuando se observa que el perfil del momento lineal a lo largo del radio es el mismo perfil que el de la velocidad multiplicada por una constante que es la densidad. El perfil de velocidad es como el representado en la Figura 4.8 ya que es un flujo turbulento.

El valor de las variables según las condiciones de contorno representadas en la Tabla 3.3 (Para Z=0mm):

$$v_{z,media} = \frac{v_{int}A_{int} + v_{ext}A_{ext}}{A_T} = 1.365 \text{ m/s} \quad \text{Ec 4. 5}$$

$$(\rho v_z)_{media} = \frac{v_{int}\rho_{int}A_{int} + v_{ext}\rho_{ext}A_{ext}}{A_T} = 0.45 \text{ kg/m}^3\text{s}^2 \quad \text{Ec 4. 6}$$

A partir de la Ecuación 4.4:

$$G = (\rho v_z)_{media}A_T = 1.11 \times 10^{-3} \text{ kg/s} \quad \text{Ec 4. 7}$$

En la Figura 4.15 se representan las mismas variables obtenidas del software de post-procesado, que en este caso se ha usado Tecplot 360. Los resultados son exactamente iguales para ambos casos ya que la única especie diferente es el aditivo y en ambos casos tiene la misma velocidad y densidad. Como todas las propiedades calculadas dependen de estas dos variables (menos el área) los resultados serán iguales.

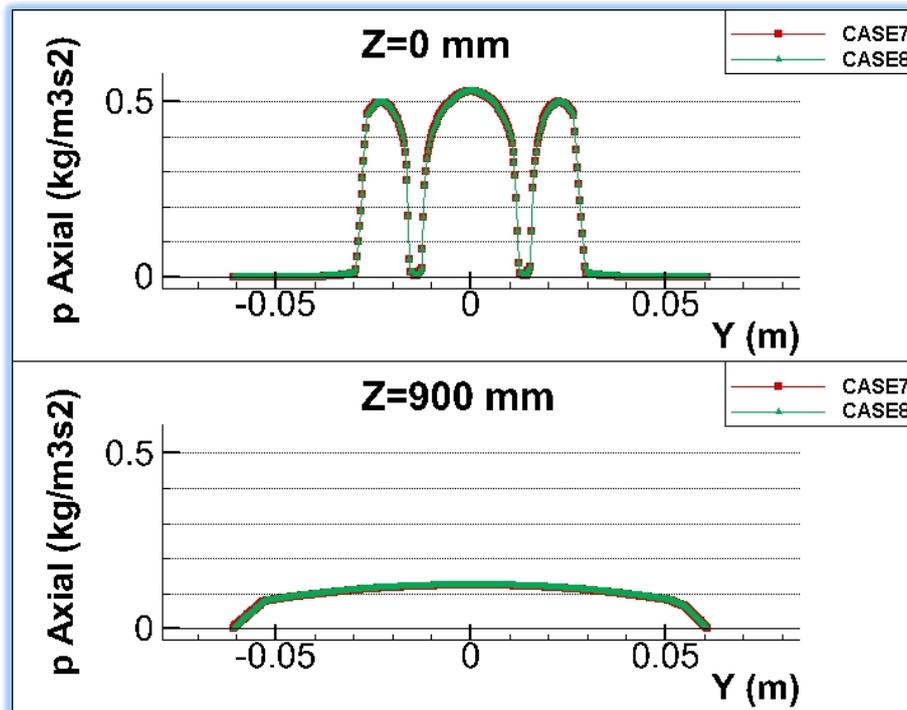


Figura 4. 13 Gráficas de la cantidad de movimiento en dirección axial para los casos 7 y 8 para dos planos Z=constante

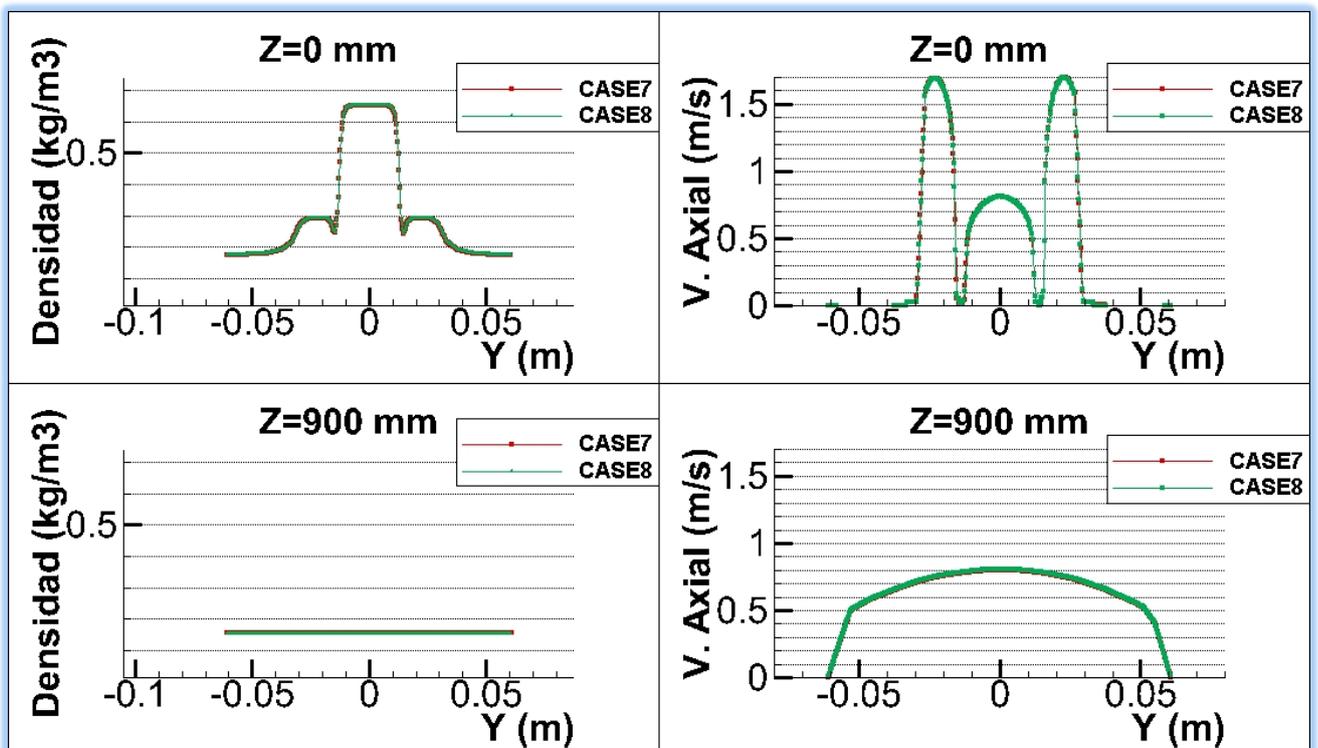


Figura 4. 14 Gráficas de la densidad y de la velocidad axial de los casos 7 y 8 para dos planos Z=constante

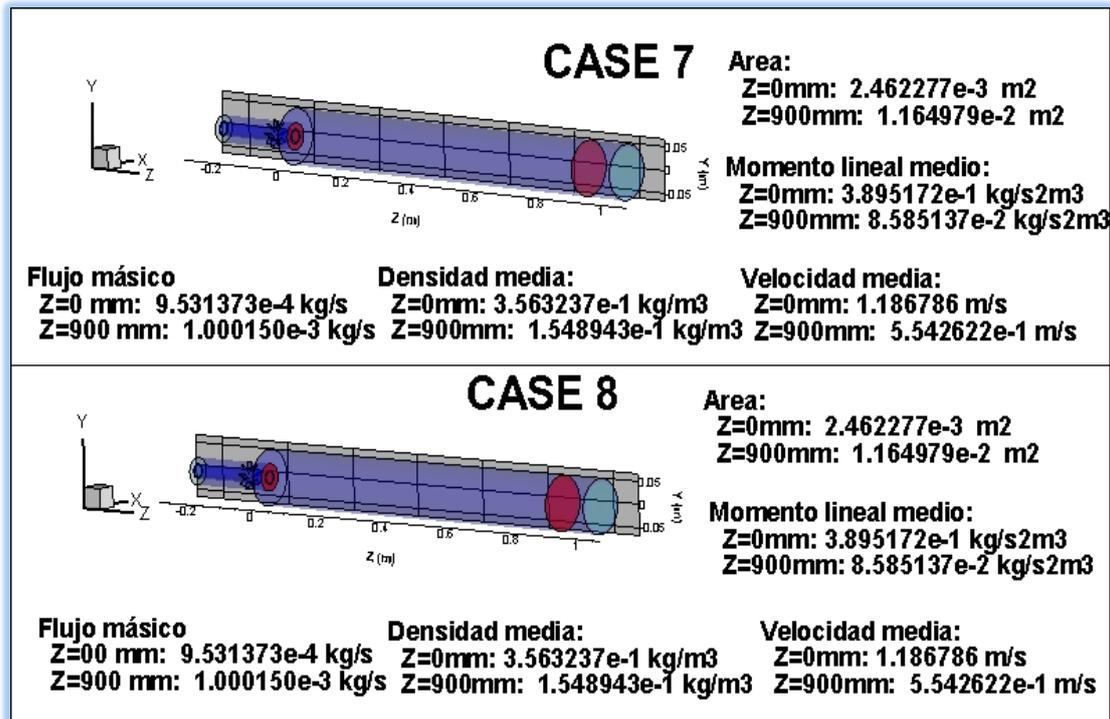


Figura 4. 15 Representación de las variables calculadas en las ecuaciones 4.1-4.7 para los casos 7 y 8.

El momento lineal medio calculado en la Ecuación 4.7 es el obtenido al integrar las variables a lo largo de las toberas. Debido a que se suponen las propiedades constantes a lo largo del radio esta integración ha podido calcularse con una simple suma. Este momento lineal es equivalente al momento expuesto en la Figura 4.15 en el plano Z=0mm. El momento lineal disminuye en el plano Z=900mm porque tanto la velocidad como la densidad media disminuyen considerablemente.

Los valores obtenidos por cálculos a partir de las condiciones de contorno de la cantidad de movimiento, velocidad axial y flujo másico son siempre mayores que los obtenidos del post-proceso. Estos valores deben ser comparados con los valores expuestos en la Figura 4.14 para poder analizar donde se producen las pérdidas de velocidad y cantidad de movimiento. Tanto la velocidad media como la densidad media o el momento lineal medio no pueden compararse con los valores de las gráficas ya que están calculados en el plano Z=0mm. Los valores deben ser calculados para cada tobera individualmente.

$$(\rho_{media})_{int} = 0.655 \text{ kg/m}^3 \quad \text{Ec 4. 8}$$

$$(v_{z,media})_{int} = 0.66 \text{ m/s} \quad \text{Ec 4. 9}$$

$$((\rho v_z)_{media})_{int} = 0.432 \text{ kg/m}^3 \text{ s}^2 \quad \text{Ec 4. 10}$$

Para la tobera exterior:

$$(\rho_{media})_{ext} = 0.295 \text{ kg/m}^3 \quad \text{Ec 4. 11}$$

$$(v_{z,media})_{ext} = 1.54 \text{ m/s} \quad \text{Ec 4. 12}$$

$$((\rho v_z)_{media})_{ext} = 0.456 \text{ kg/m}^3 \text{ s}^2 \quad \text{Ec 4. 13}$$

Al comparar estos datos con los representados en la parte superior de la Figura 4.14 se observa que los valores medios de las variables son muy cercanos a los valores máximos de cada variable en cada tobera individual pero los perfiles que se obtienen en las gráficas no son constantes, son ondulados centrados en el valor máximo de cada variable en cada tobera (excepto para la densidad que se mantienen constantes), esto sucede así debido a que las paredes de las toberas mediante rozamiento deceleran al fluido provocando pérdidas de velocidad y de cantidad de movimiento. El valor máximo está centrado debido a que es el punto más alejado de las toberas, es por ello que se forma el perfil expuesto en la Figura 4.8. Se llega a la conclusión de que el fluido pierde velocidad y cantidad de movimiento independientemente de las condiciones de contorno que impongan. Es por ello que los cálculos de flujo másico no dan el mismo resultado siendo calculados con el software de post-proceso que manualmente con las condiciones de contorno. Una posibilidad para conseguir la velocidad media impuesta por las condiciones de contorno sería variando el tratamiento de pared pero esto pertenece a un ámbito no estudiado aquí.

Es importante destacar por qué no todos los resultados de flujo másico son iguales en la Figura 4.12. En ambos casos el flujo másico en el plano situado en $Z=50$ mm es notablemente mayor que los flujos a través de los otros dos planos que están más alejados de la inyección. La diferencia es notable, alrededor de un 10%. Se debe a la recirculación de masa que se produce por el Swirl con el que entra el fluido en la cámara de combustión. Como se explicó anteriormente en la Figura 4.7 se puede observar que en todos los casos la velocidad en $Z=50$ mm es negativa cuando se mide cerca de las paredes. También se puede visualizar con las iso-superficies representadas en la Figura 4.12, la zona representada por el color azul representan todas las celdas que contienen fluido con velocidad axial nula. Estos puntos representan la geometría toroidal que envuelve al remolino que causa la recirculación.

Se puede observar que el primer plano analizado ($Z= 50 \text{ mm}$) se encuentra antes de que la zona de recirculación termine, esto produce que a través del plano circule más masa que a través de los siguientes planos y por ello el flujo másico es mayor.

4.3.2 ANÁLISIS DE TEMPERATURAS Y DE FRACCIONES MÁSICAS

En los contornos de temperatura representados en la Figura 4.16 se puede observar que las temperaturas en el caso 7 son más altas que en el caso 8 y ambas considerablemente mayores que en el caso 9. Las temperaturas se mantienen iguales hasta que se produce la inyección y la combustión donde la temperatura en el CASE 7 se dispara alcanzando en las zonas cercanas a la pared 2000K mientras que el caso 8 no se alcanza la temperatura máxima hasta más avanzada la combustión cerca del plano $Z=150\text{mm}$. Ambas alcanzan un valor mínimo a lo largo del eje de simetría y va aumentando según se acercan las paredes. Esto se debe a que el quemador se ha supuesto adiabático de manera que no cede nada de calor al exterior de manera que el fluido puede estar caliente cerca de las paredes que éstas no absorberán calor.

La diferencia de temperaturas se debe a que en el CASE 7 se ha usado el aditivo de tipo 2 y en el CASE 8 se ha usado el aditivo de tipo 1. Ambos tienen la misma densidad y peso molecular pero la diferencia fundamental se basa en que el helio (add1) tiene un calor específico mucho mayor que el metano (add2), es decir, requiere mucha más energía para ser calentado que el metano, de manera que el caso con metano podrá alcanzar temperaturas mayores con un combustible igual.

Como se mencionó en la sección 3.1, el aditivo de tipo 1 está compuesto por helio pero la base de datos de Fluent fue modificada con el objetivo de conseguir una molécula con un peso molecular parecido a la del metano. Cabe recordar que lo que intenta con este procedimiento es conseguir un aditivo con propiedades similares al metano pero que no reaccione al ser mezclado con aire a altas temperaturas. Para conseguir esto se eligió el helio ya que es un gas noble de peso molecular $4,0026 \text{ g/mol}$. De manera que para conseguir una molécula con el mismo peso y así lograr la densidad necesaria por la tobera interior se creó en la base de datos de Fluent una molécula formada por cuatro átomos de helio. Esto ha dado buenos resultados como se ha observado en la Figura 4.9 y en la Figura 4.15.

El caso 9 tiene propiedades completamente diferentes a los casos 7 y 8 ya que la mezcla que se inyecta por la tobera interior carece del combustible suficiente como para formar una mezcla estequiométrica, y por ello las temperaturas son menores a lo largo de todo el quemador como se observa en la Figura 4.17. La riqueza de las mezclas será explicada más adelante en este capítulo, en la sección 4.5.

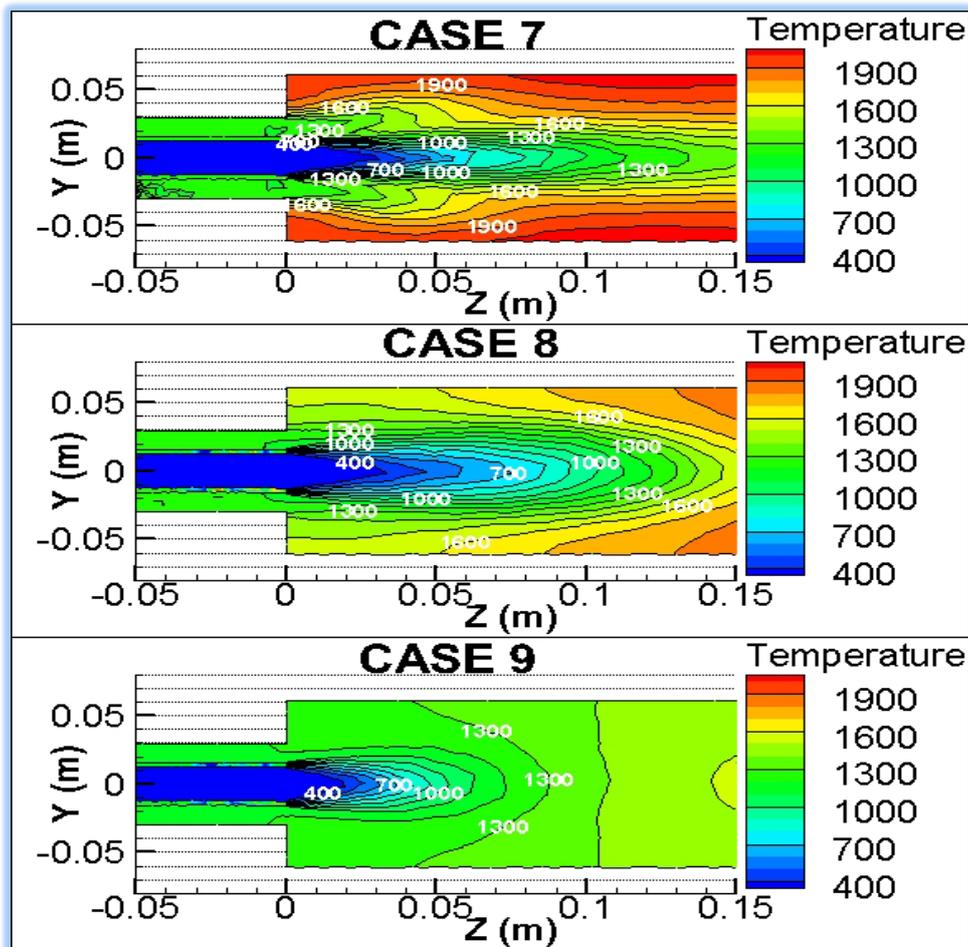


Figura 4. 16 Contornos de temperatura de los casos simulados con PDF

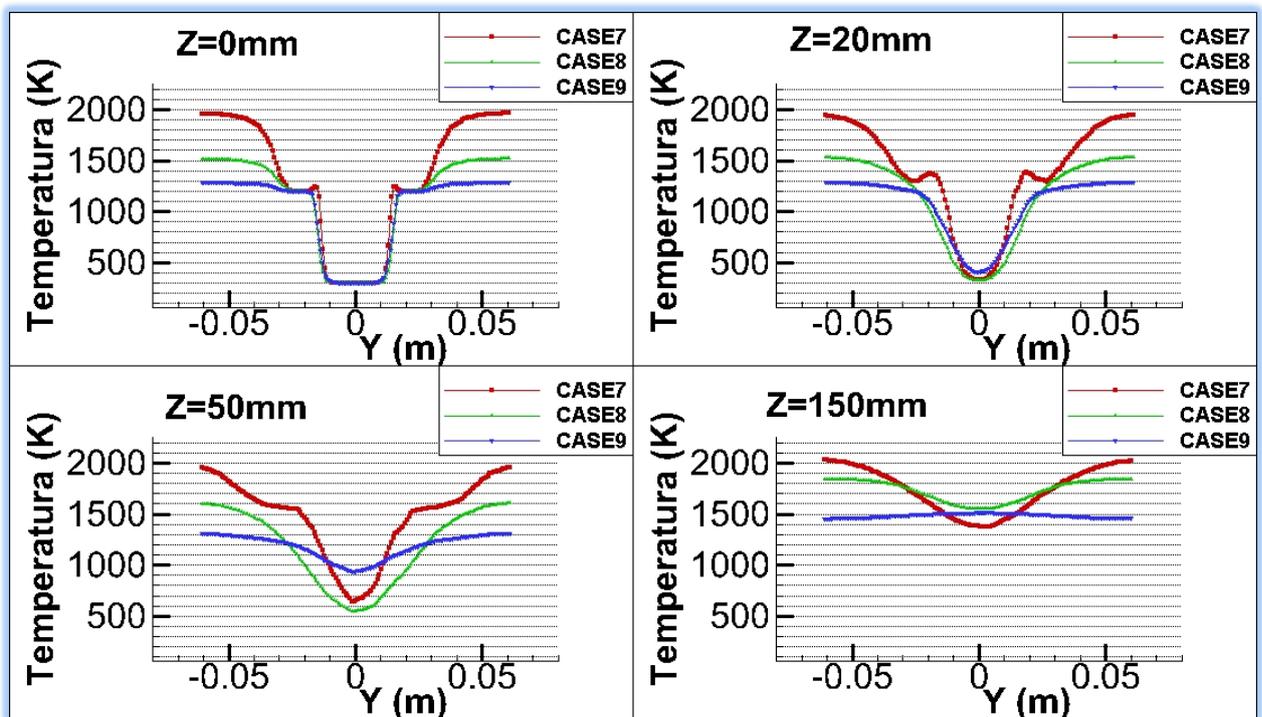


Figura 4. 17 Gráficas de la temperatura de los casos simulados con PDF en cuatro planos Z=constante

El caso 9 tiene propiedades completamente diferentes a los casos 7 y 8 ya que la mezcla que se inyecta por la tobera interior carece del combustible suficiente como para formar una mezcla estequiométrica, y por ello las temperaturas son menores a lo largo de todo el quemador como se observa en la Figura 4.17. La riqueza de las mezclas será explicada más adelante en este capítulo, en la sección 4.5.

Como se puede observar en la Figura 4.17 las temperaturas en el caso 7 son mayores que en los demás sobre todo al inicio. Esto se debe a una combustión diferente entre los casos ya que se está inyectando la misma cantidad de combustible y de comburente en los casos 7 y 8. Esta diferencia en la combustión se visualiza en la Figura 4.18 donde se representan los contornos de fracción másica de H_2O , que es un producto directo de la combustión de CH_4 . Según la ecuación estequiométrica de combustión del metano por cada mol de CH_4 quemado se producen dos de H_2O . Esta relación lineal permite que el H_2O refleje correctamente la evolución de la combustión. En el caso 7 se inicia la combustión inmediatamente en las zonas de mezcla (entre las dos toberas) ya que se ve que empieza a aparecer agua en el plano inicial. En el caso 8, en el inicio, la mezcla solo se forma en el exterior ya que cerca del eje no se forma nada de vapor de agua. Esto explica el incremento de temperatura que se da cerca de las paredes, representado en la Figura 4.17. El caso 9 se comporta de manera similar al caso 7 pero con una producción de agua mucho menor porque, como se ha mencionado antes, la mezcla es pobre.

4.4 ED (EDDY DISSIPATION)

En este apartado se expondrá brevemente el caso simulado con el modelo ED. Los resultados son menos exactos que en los casos anteriores ya que no tiene en cuenta la relación entre cinética química y turbulencia. Pero puede ser de utilidad ya que al ser necesario introducir manualmente las reacciones que se deseen simular se obtiene un mejor control sobre la simulación.

En la Figura 4.18 se han representado los contornos de velocidad axial, densidad, fracción másica de aditivo y temperatura. Se observa que el CASE 11 se desarrolla de forma similar a los analizados anteriormente. Los contornos de velocidad y de densidad son muy similares a los obtenidos con EDC o PDF.

En cambio, los contornos de fracción másica y temperatura son ligeramente distintos. En la fracción másica de aditivo se alcanzan valores más bajos (más cercanos al valor estacionario) más rápido que con los modelos EDC y PDF. En cuanto a la temperatura, se alcanzan valores intermedios entre los obtenidos con el PDF (con add3) y en EDC.

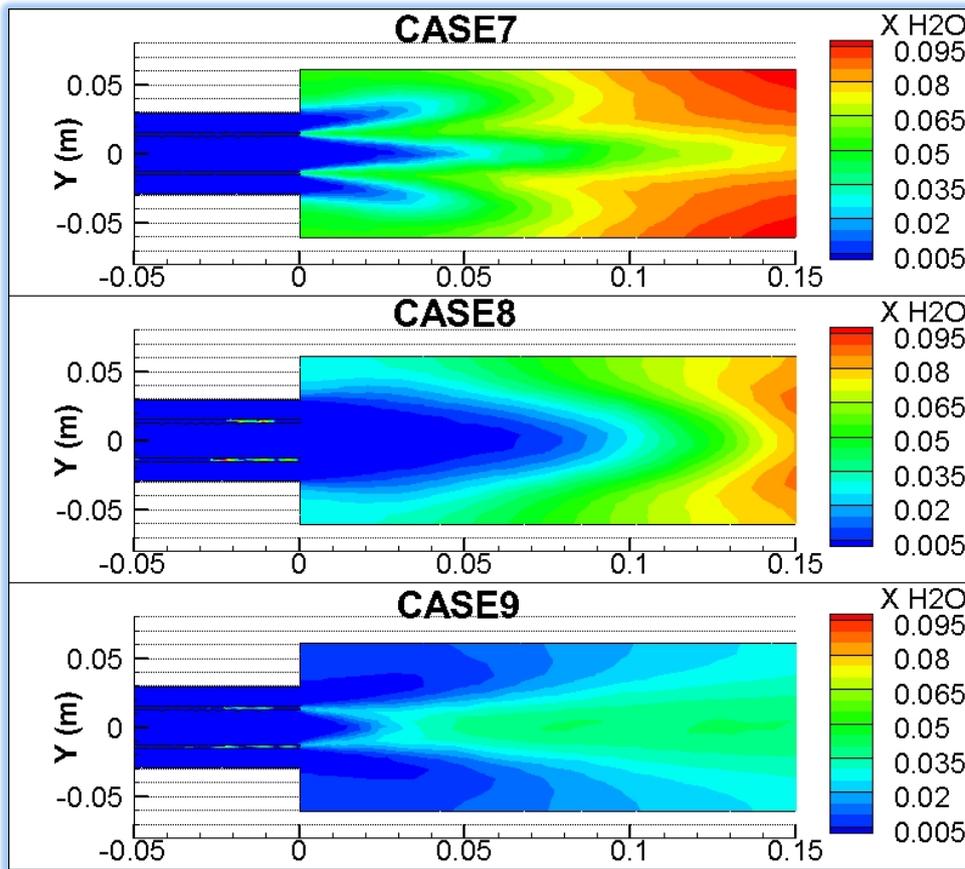


Figura 4. 18 Contornos de fracción másica de agua de los modelos simulados con PDF

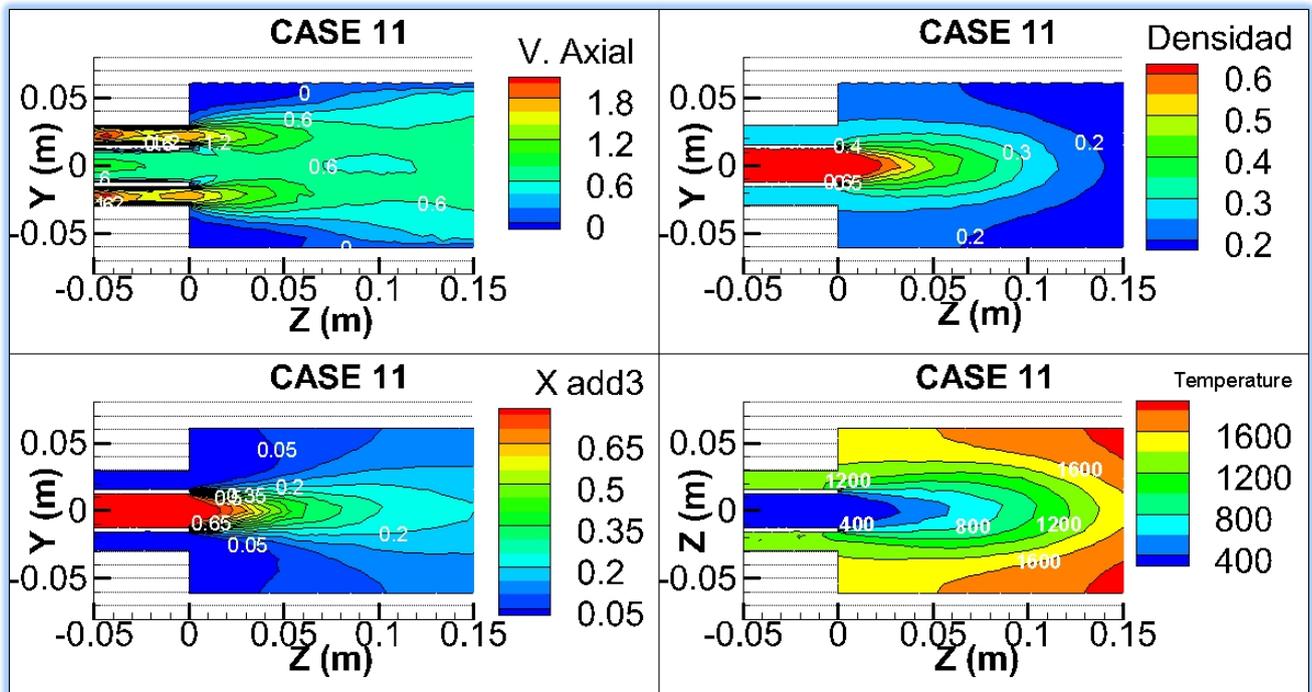


Figura 4. 19 Contornos de velocidad axial, fracción másica de aditivo, temperatura y densidad para el modelo simulado con ED

4.5 ANÁLISIS DE LA MEZCLA

Para obtenerla cantidad estequiométrica de metano para unas condiciones de entrada de aire y de combustible específicas:

$$G_{aire} = \rho_{aire} \cdot A_{exterior} \cdot V_{exterior} = 8,99 \cdot 10^{-4} kg/s \quad \text{Ec 4. 14}$$

La densidad del aire es dependiente la temperatura y por ello a 1200 K es 0,295 kg/m³

A partir de este gasto de aire se obtiene el gasto de oxígeno, se sabe que la fracción másica de oxígeno en el aire es de 0,231.

$$G_{O_2} = G_{aire} \cdot 0,231 = 2,07 \cdot 10^{-4} kg/s \quad \text{Ec 4. 15}$$

De la ecuación estequiométrica de la combustión del metano se puede obtener el gasto de metano necesario:



De aquí se deduce que se necesitan la mitad de moles de metano que de oxígeno. Lo que es lo mismo decir que se necesitará la cuarta parte de masa de metano que de oxígeno dado que:

$$M_{O_2} = 32 \frac{g}{mol} \text{ y } M_{CH_4} = 16 \frac{g}{mol} \quad \text{Ec 4. 17}$$

$$G_{CH_4} = G_{O_2}/4 = 5,2 \cdot 10^{-5} kg/s \quad \text{Ec 4. 18}$$

Para hallar la fracción másica de metano en la mezcla combustible se parte del resultado anterior y se deduce a partir del gasto por la tobera interior.

$$G_{combustible} = \rho_{combustible} \cdot A_{interior} \cdot V_{interior} = 2,11 \cdot 10^{-4} kg/s \quad \text{Ec 4. 19}$$

$$Y_{CH_4} = G_{CH_4}/G_{combustible} = 0,243 \quad \text{Ec 4. 20}$$

De aquí se puede deducir la proporción metano-aire necesaria para que la mezcla sea estequiométrica, es decir, el dosado de la mezcla. Este resultado es útil para comparar más mezclas con la estequiométrica, es decir, para hallar el dosado relativo de las demás mezclas. El dosado se define como:

$$\phi = \frac{G_{CH_4}}{G_{aire} + G_{combustible}} \quad \text{Ec 4. 21}$$

Para este caso:

$$\phi = \frac{5,2 \cdot 10^{-5}}{8,99 \cdot 10^{-4} + 2,11 \cdot 10^{-4}} = 0,047 \quad \text{Ec 4. 22}$$

Se aprovechará para definir el concepto de dosado relativo. El dosado se define como la proporción de combustible en comparación con el dosado relativo de esa mezcla:

$$\phi_r = \frac{G_{CH_4}}{G_{CH_4,estequiométrico}} \quad \text{Ec 4. 23}$$

Si $\phi_r > 1$ la mezcla se considera rica

Si $\phi_r < 1$ la mezcla se considera pobre

Si $\phi_r = 1$ la mezcla se considera estequiométrica

Los valores obtenidos anteriormente son válidos en caso de que se esté trabajando con un aditivo con la misma densidad que el metano, ya que en la Ecuación 4.16 se ha usado la densidad del metano ($0,65 \text{ kg/m}^3$). Esto es válido para cuando se usa el aditivo 1 o 2. En cambio cuando se usa helio como aditivo la mezcla no será estequiométrica ya que el helio tiene una densidad diferente.

Las características del experimento se mantienen constantes, solo se cambian la composición de la mezcla de combustible, por lo tanto todos los valores calculados del comburente se mantienen constantes. Se parte de las Ecuaciones 4.15 - 4.22 Siendo la densidad del helio $0,1625 \text{ kg/m}^3$

$$\rho_{combustible} = \frac{1}{\frac{X_{add}}{\rho_{add}} + \frac{X_{CH_4}}{\rho_{CH_4}}} = \frac{1}{\frac{0,766}{0,1625} + \frac{0,234}{0,65}} = 0,2 \text{ kg/m}^3 \quad \text{Ec 4. 24}$$

De la ecuación 4.19:

$$G_{combustible} = 6,5 \cdot 10^{-5} \text{ kg/s} \quad \text{Ec 4. 25}$$

Con la ecuación 4.20:

$$G_{CH_4} = Y_{CH_4} \cdot G_{combustible} = 1,52 \cdot 10^{-5} \text{ kg/s} \quad \text{Ec 4. 26}$$

$$G_{total} = G_{combustible} + G_{aire} = 9,64 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s} \quad \text{Ec 4. 27}$$

$$\phi = 0,01577 \quad \text{Ec 4. 28}$$

$$\phi_r = 0,335 < 1$$

Ec 4. 29

Se puede afirmar que la mezcla es pobre.

En el caso de que se use helio como aditivo las condiciones de contorno quedarían reflejadas en la Tabla 4.4.

Tabla 4. 4 Condiciones de contorno para los casos de aditivo helio

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m3/s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	0.234	0.766	0	0	0.66	6.5E-05	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.1625	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	1.52E-05	4.98E-05	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m3)
Características geométricas						9.64E-04	0.285
Área Interior (m2)	Área Exterior (m2)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

En el caso de que la mezcla de combustible esté formada al 100% por metano las condiciones de contorno están representadas en la Tabla 4.5

Tabla 4. 5 Condiciones de contorno para los casos de mezcla Rica.100

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m3/s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	1	0	0	0	0.66	2.11E-04	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.65	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	2.11E-04	0	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m3)
Características geométricas						1.11E-03	0.329
Área Interior (m2)	Área Exterior (m2)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

4.6 COMPARACIÓN DE LOS MODELOS DE COMBUSTIÓN

A lo largo del capítulo se han expuesto los resultados de los distintos casos estudiados con condiciones de contorno iguales. Para conocer la influencia los modelos de combustión en los resultados será necesario compararlo entre ellos.

Para hacer una comparación razonable entre los dos principales modelos usados será necesario escoger casos con las mismas condiciones de contorno, mismas especies involucradas y misma proporción de cada una de ellas. Por ello se pueden comparar el caso 3 con el 7, el 4 con el 8, el 5 con el 9, etc. Por simplicidad se compararán dos casos en los que la mezcla que se inyecta por la tobera interior está formada en un 100% por metano así se reducirá el número de especies involucradas en la mezcla y los resultados serán más fáciles de analizar. Los resultados de esta mezcla deben ser muy parecidos a los resultados obtenidos en los casos que se ha usado el aditivo de tipo 2 ya que este aditivo tiene las mismas propiedades que el metano, y como se ha inyectado la cantidad máxima de metano (dosado estequiométrico) se quemará la misma cantidad de metano en ambos casos.

En las Figuras 4.20 y 4.21 se representan las temperaturas a lo largo del quemador. Se puede observar que con el modelo EDC resultan unas temperaturas más altas que con el PDF. Cabe destacar el ligero aumento de temperatura que ocurre al inicio de la inyección entre las dos toberas, este incremento no ocurre en el modelo con PDF. Este inicio se da fundamentalmente porque esa zona es la primera zona de contacto entre el combustible y el comburente

En la Figura 4.21 se puede ver que salvo en el inicio donde en el modelo PDF las temperaturas en los extremos son ligeramente más altas, las temperaturas en el modelo con EDC son más altas a lo largo de todo el quemador. En ambos modelos las temperaturas máximas se dan en los extremos a una altura aproximada de $Z=150\text{mm}$. La diferencia de temperaturas no se da porque se queme combustible a un ritmo distinto en los dos modelos ya que como se visualiza en la Figura 4.23 a lo largo de todo el quemador la cantidad de metano se mantiene igual en los dos casos.

La otra diferencia fundamental entre ambos modelos es la cinética. Como se observa en la Figura 4.23 las velocidades axiales son ligeramente distintas siendo algo mayores en el modelo EDC. Al ser mayores las velocidades, para mantenerse el flujo másico constante y que así se cumpla la ecuación de continuidad es necesario que las densidades en el caso EDC sean algo menores que en el modelo PDF y así se comprueba en la Figura 4.24.

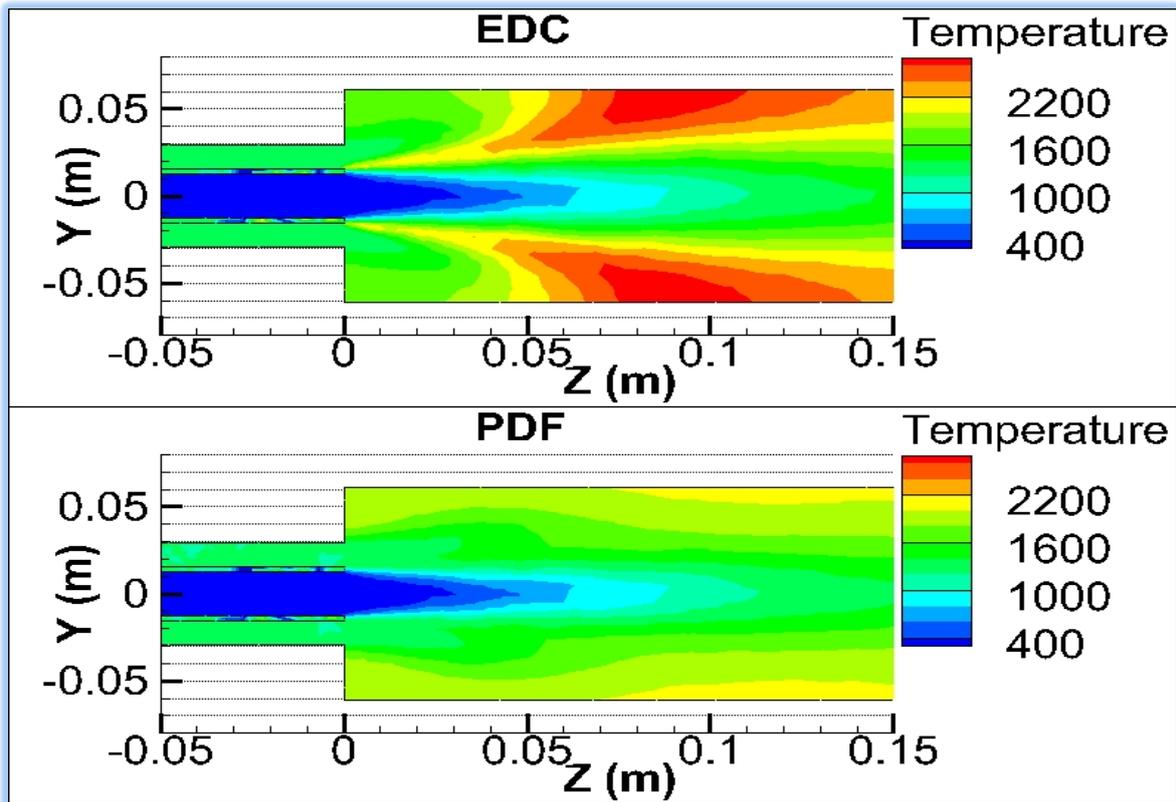


Figura 4. 20 Contornos de temperatura obtenidos con los modelos EDC y PDF

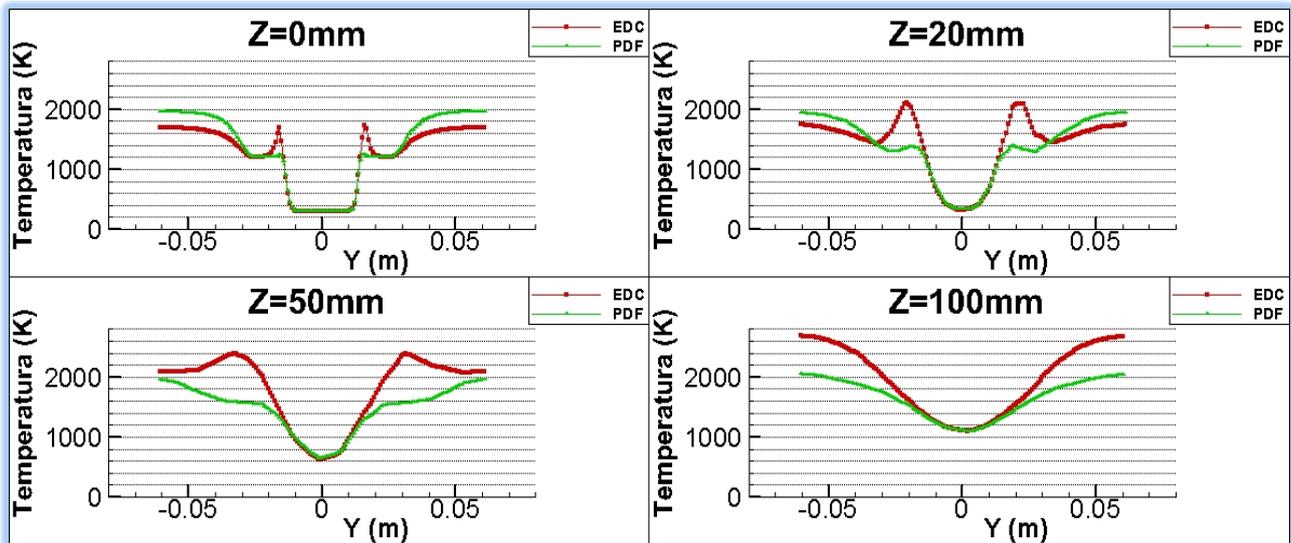


Figura 4. 21 Gráficas de las temperaturas en los modelos EDC y PDF en función de la coordenada radial para cuatro planos Z=constante

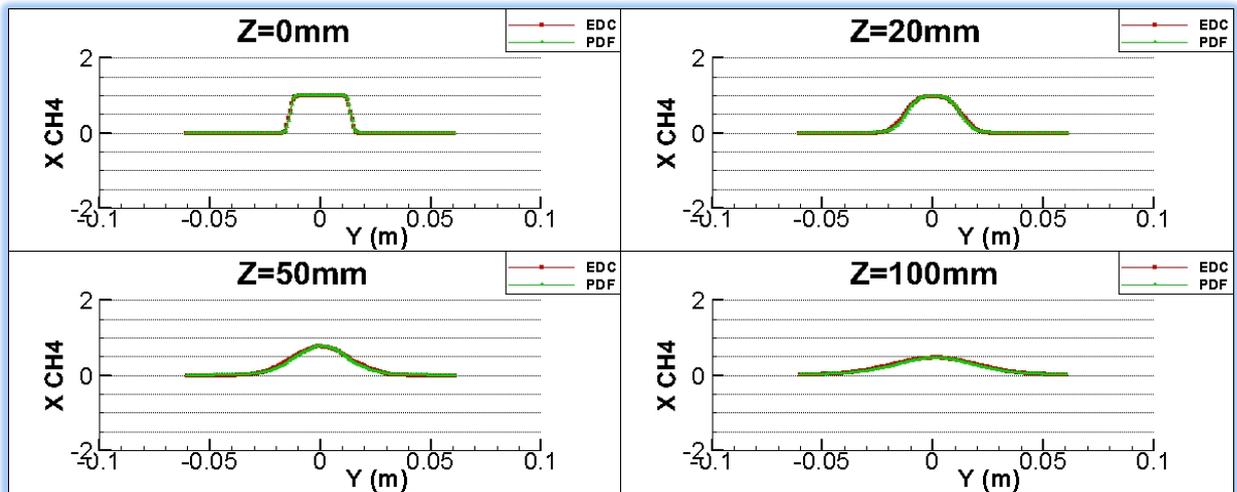


Figura 4. 22 Gráficas de las fracciones másicas de metano en los modelos EDC y PDF en función de la coordenada radial para cuatro planos Z=constante

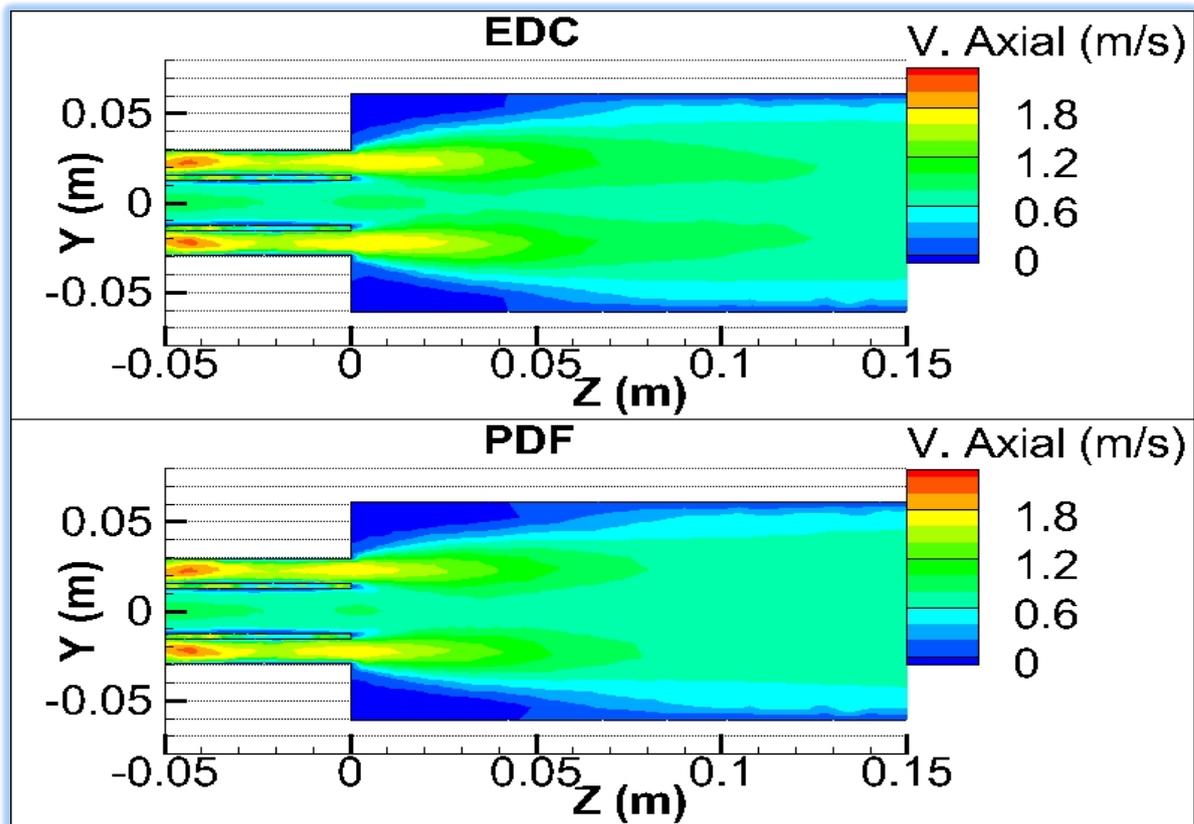


Figura 4. 23 Contornos de velocidad axial para dos modelos simulados con EDC y PDF

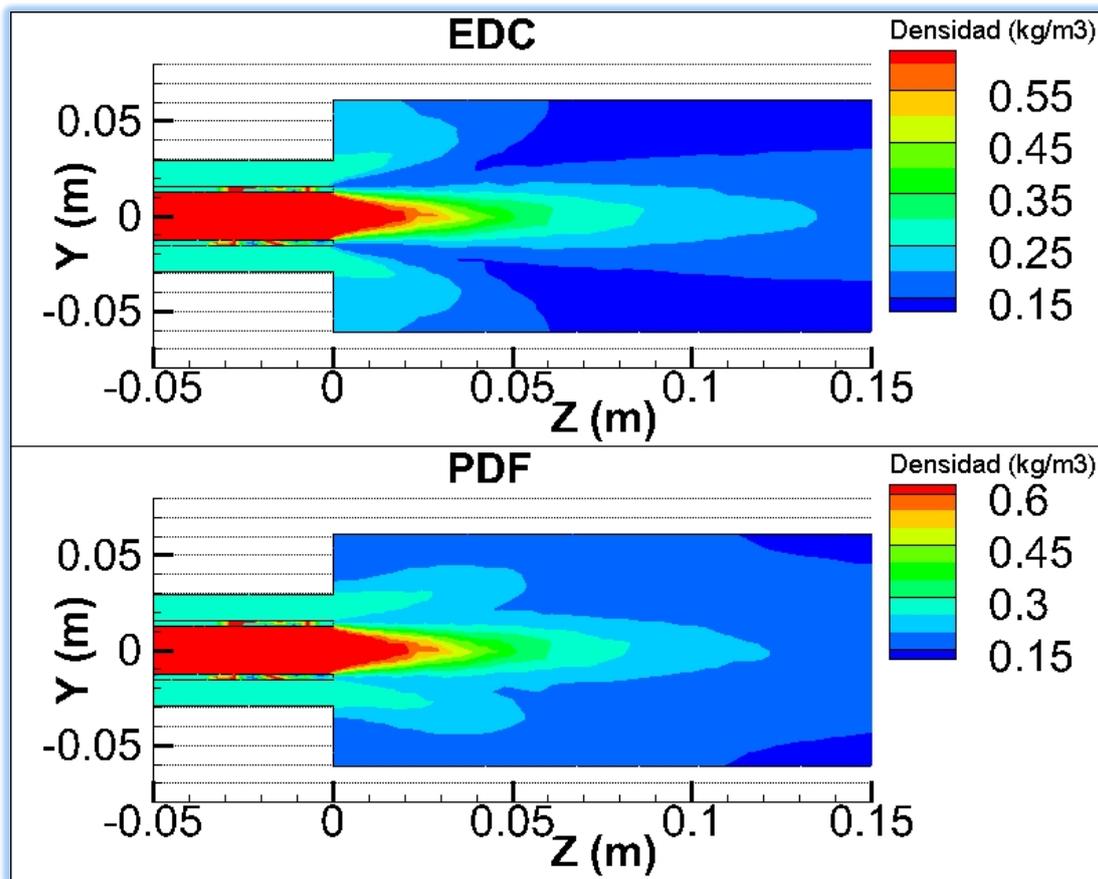


Figura 4. 24 Contornos de densidad para dos modelos simulados con EDC y PDF

Para escoger el modelo de combustión que más se adecúe a la realidad será necesario validarlo con resultados ajenos a las simulaciones numéricas. Para ello se procederá a calcular los valores de temperatura en función de diferentes proporciones de mezcla. Esto se utiliza mediante la validación de distintos puntos del quemador en función de la fracción másica de metano por medio de la calculadora de equilibrio químico CEA. Esta calculadora fue desarrollada por la NASA en el “Lewis (Glenn) Research Center” para calcular las variables termodinámicas a partir de unas condiciones de contorno impuestas por el usuario (en este caso son presión constante y proceso adiabático) y de unas especies químicas en una proporción específica.

Para la validación se partirá de los datos obtenidos de una sección en donde se esté produciendo la combustión y se compararán los puntos obtenidos con los calculados por CEA. Para ello es necesario usar casos en los que se utilicen sustancias reales ya que la calculadora no admite cambiar las propiedades a los elementos. De manera que se compararán los casos Caso_RICA.100 por su simplicidad. Las proporciones en las que se encuentra cada especie se exponen en la Tabla 4.5. Estos valores son necesarios para ser introducidos en CEA.

Tabla 4. 6 Gastos y fracciones másicas de cada especie utilizada en la validación

Gasto (kg/s)	G_CH ₄	G_He	G_O ₂	G_N ₂
100% de CH ₄	2.11E-04	0	2.07E-04	6.92E-04
Fracción másica	X_CH ₄	X_He	X_O ₂	X_N ₂
100% de CH ₄	0.19	0	0.19	0.62

En la gráfica superior de la Figura 4.25 se ha representado los resultados obtenidos de CEA. Como era de esperar la temperatura más alta coincide con la fracción másica de metano estequiométrica para estas condiciones de contorno (aproximadamente 0.05). A partir de este valor, si se aumenta o disminuye la cantidad de metano en la mezcla la temperatura disminuye. Ocurre lo mismo para el modelo EDC expuesto en la segunda gráfica de la Figura 4.25.

Es importante comparar los tiempos de computación de cada modelo de combustión, ya que representa un uso directo de los recursos de investigación. Los costes de computación para los casos que han sido analizados en este capítulo están expuestos en la Tabla 4.7.

Tabla 4. 7 Tiempos de simulación de cada caso utilizado en el capítulo 4

Caso	Tiempo de simulación hasta convergencia (min)	Modelo de Combustión
Caso 0	25	Mezcla
Caso 3	250	EDC
Caso 4	265	
Caso 5	220	
Caso 7	40	PDF
Caso 8	45	
Caso 9	30	
Caso 11	280	ED
Caso_RICA.100.PDF	30	PDF
Caso_RICA.100.EDC	170	EDC

Es sencillo comprobar que es el modelo EDC el que más se aproxima a los resultados ideales de temperatura. El modelo PDF forma un perfil de temperaturas radicalmente distinto hasta fracciones másicas muy altas, que en el ámbito de este trabajo resultan irrelevantes. Aunque el tiempo de simulación de EDC frente a PDF sea mucho mayor los resultados son de mejor calidad.

Se puede concluir que el modelo EDC es el adecuado para realizar las simulaciones en este quemador con estas condiciones de contorno. Las temperaturas son ligeramente menores que las obtenidas con CEA pero se asemejan a lo largo de todo el rango de fracciones másicas.

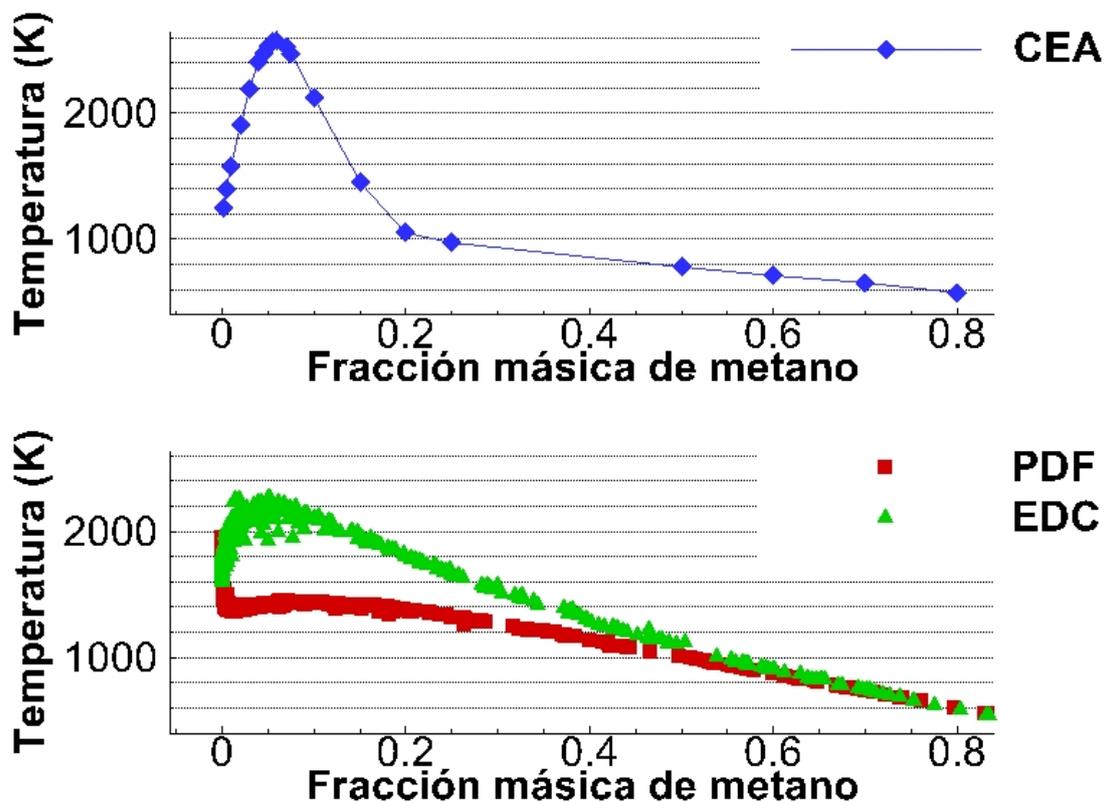


Figura 4. 25 a) Resultados de la temperatura en función de la fracción másica de metano en equilibrio químico obtenidos mediante CEA b) Temperatura en función de la fracción másica de metano para los modelos simulados con EDC y con PDF.

4.7 CONCLUSIONES SOBRE EL ADITIVO

A lo largo de este capítulo se ha trabajado con tres tipos de aditivos. El aditivo de tipo 1 formado por helio con un peso molecular y una densidad similares a las del metano, el aditivo de tipo 2 formado por una sustancia inerte con las mismas características físicas que el metano y por último helio.

A partir de los resultados obtenidos en el análisis de la mezcla se puede concluir que al usar helio como aditivo, con las mismas condiciones de contorno impuestas para que la mezcla sea estequiométrica cuando se usa un aditivo con la misma densidad que el metano, la mezcla que se forma será muy pobre con un dosado relativo de aproximadamente 1/3. Por ello en los resultados estudiados en el caso 9 las temperaturas siempre son menores que en los casos 7 y 8 (Figuras 4.16 y 4.17). Por consiguiente se conseguirán unas características similares a las que se obtienen con una mezcla pobre; este tipo de mezclas se estudian en el capítulo siguiente donde se analiza la influencia del dosado.

Las diferencias entre el aditivo 1 y el aditivo 2 considerables al principio de la cámara de inyección (Figura 4.2, 4.16 y 4.17), pero cuando los perfiles se homogenizan (al final de la cámara) las propiedades son muy similares para ambos casos. Estas diferencias iniciales se dan porque la combustión se desarrolla de manera distinta como se ha comprobado con la Figura 4.18.

En conclusión el aditivo de tipo 1, que es el que se ha pretendido introducir en este trabajo como sustitución del tipo 2, no da los mismos resultados, especialmente cuando se habla de resultados dinámicos. Sin embargo el resultado global de la combustión es el mismo en ambos casos, así como los resultados cinemáticos, que son prácticamente indistinguibles entre ambos casos. Así que, en caso de la utilización del aditivo de tipo 1 se deberá prestar atención a las zonas iniciales del quemador, especialmente a las propiedades relacionadas con la densidad. Pero se puede asegurar con confianza que el resultado final de la combustión será igual que el obtenido con el aditivo de tipo 2.

Los resultados explicados en este apartado se exponen en la Tabla 4.8

Tabla 4. 8 Esquema de los resultados de los obtenidos con diferentes aditivos

Caso	Aditivo	Resultados
Caso 0	Add 2	Resultados usados como validación. Aditivo con las mismas propiedades que el CH ₄ pero inerte, es decir, no reacciona bajo ninguna condición.
Caso 3	Add 2	
Caso 7	Add 2	
Caso 11	Add 2	
Caso 4	Add 1	Contornos de densidad y velocidad muy similares a los obtenidos con el add2. Debido a la gran diferencia en calor específico las temperaturas obtenidas son muy alejadas de la realidad. Numero de Prandtl menor, por ello se obtiene un mejor mezclado
Caso 8	Add 1	
Caso 5	He	Contornos de densidad, temperatura y velocidad muy diferentes a los obtenidos con el add2 debido a la gran diferencia en densidad (y en consecuencia flujo másico también) y de calor específico
Caso 9	He	

5 CAPÍTULO

INFLUENCIA DEL DOSADO

5.1 PRESENTACIÓN

En este capítulo se estudia la influencia del dosado sobre la evolución de la combustión en la cámara. Para ello se analizarán tres mezclas, una rica, una pobre y una estequiométrica. Como se explicó en el capítulo anterior, la mezcla estequiométrica es aquella en la que se inyecta la cantidad justa de metano que se puede quemar con el oxígeno inyectado si existiese mezcla perfecta. Como en las tres mezclas tienen las mismas condiciones de contorno, es decir se les inyecta la misma cantidad de comburente, el dosado de la mezcla se conseguirá variar mediante la riqueza en metano del combustible. Las condiciones de contorno de la mezcla pobre, estequiométrica y rica están representadas en las Tablas 5.1, 5.2 y 5.3 respectivamente.

El dosado relativo de la llama rica será de 1,13 y el de la llama pobre será de 0,57. A partir de ahí se pueden calcular el gasto de metano para cada caso:

Según la definición que se dio del dosado relativo en el capítulo 4:

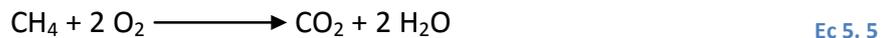
$$\phi_r = \frac{G_{CH_4}}{G_{CH_4,estequiométrico}} \quad \text{Ec 5.1}$$

A partir de las masas moleculares de oxígeno y metano se puede calcular la proporción de oxígeno por cada mol de metano:

$$M_{O_2} = 32 \frac{g}{mol} \quad \text{y} \quad M_{CH_4} = 16 \frac{g}{mol} \quad \text{Ec 5.2}$$

$$G_{aire} = \rho_{aire} \cdot A_{exterior} \cdot V_{exterior} = 8,99 \cdot 10^{-4} kg/s \quad \text{Ec 5.3}$$

$$G_{O_2} = G_{aire} \cdot 0,231 = 2,07 \cdot 10^{-4} kg/s \quad \text{Ec 5.4}$$



$$G_{CH_4,estequiométrico} = G_{O_2}/4 = 5,2 \cdot 10^{-5} kg/s \quad \text{Ec 5.6}$$

Una vez hallado el gasto estequiométrico, basta con multiplicarlo por el dosado para hallar el gasto necesario de metano:

$$\phi_r = 1.13 \longrightarrow G_{CH_4} = 1.13 \times G_{CH_4,estequiométrico} = 6.24 \cdot 10^{-5} kg/s \quad \text{Ec 5.7}$$

$$\phi_r = 0.57 \longrightarrow G_{CH_4} = 0.57 \times G_{CH_4,estequiométrico} = 2.95 \cdot 10^{-5} kg/s \quad \text{Ec 5.8}$$

Tabla 5. 1 Condiciones de contorno del caso de mezcla pobre

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m ³ /s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	0.14	0.86	0	0	0.66	2.11E-04	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.65	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	2.95E-05	1.81E-04	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m ³)
Características geométricas						1.11E-03	0.329
Área Interior (m ²)	Área Exterior (m ²)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

Tabla 5. 2 Condiciones de contorno del caso de mezcla estequiométrica

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m ³ /s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	0.234	0.766	0	0	0.66	2.11E-04	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.65	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	4.93E-05	1.61E-04	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m ³)
Características geométricas						1.11E-03	0.329
Área Interior (m ²)	Área Exterior (m ²)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

Tabla 5. 3 Condiciones de contorno del caso de mezcla rica

	Combustible		Comburente		Velocidad (m/s)	Gasto (kg/s)	Caudal (m ³ /s)
	Y_CH4	Y_Add	Y_O2	Y_N2			
Tobera interior	0.28	0.72	0	0	0.66	2.11E-04	3.24E-04
Tobera exterior	0	0	0.22	0.78	1.54	8.99E-04	3.05E-03
Densidad	0.65	0.65	0.295	0.295			
Gasto individual (kg/s)	5.9E-05	1.52E-04	1.98E-04	7.01E-04		Gasto total (kg/s)	Densidad media (kg/m ³)
Características geométricas						1.11E-03	0.329
Área Interior (m ²)	Área Exterior (m ²)	Radio interior (m)	Radio ext_2 (m)	Radio ext_1 (m)			
	1.98E-03	0.0125	0.0295	0.0155			

5.2 INFLUENCIA del dosado en modelos EDC

Debido a la comparación y validación de los resultados de las simulaciones con el modelo de combustión EDC realizados en la sección 4.6, en este capítulo se procederá a simular los casos únicamente con el modelo EDC ya que se sabe que se aproximará en mayor medida a los resultados reales. Para conocer las diferencias entre el comportamiento de cada caso se analizarán los patrones de flujo (que no debe haber diferencias muy notables como se ha explicado anteriormente), las temperaturas y la evolución de la combustión. Con un buen análisis de estos tres parámetros se puede lograr un buen entendimiento de la influencia que tiene el dosado en la combustión.

Se comienza analizando los patrones de flujo. En la Figura 5.5 se han expuesto los contornos de velocidad axial. Las velocidades son iguales en los dos últimos casos y ligeramente menores en la parte final de la mezcla pobre. Esto es coherente ya que en el inicio los tres casos se comportan igual pero según va avanzando la combustión debido a que en la mezcla pobre hay menos combustible para quemar la densidad será ligeramente mayor, porque los reactivos tienen más densidad que los productos.

Lo dicho anteriormente se comprueba en la Figura 5.6 donde se observa que la densidad en la mezcla pobre es mayor que en los otros dos casos. Esto se produce porque los productos de la combustión del metano son más densos que los reactivos.

En la mezcla pobre, como hay menos combustible para reaccionar se crean menor cantidad de productos obteniéndose así una densidad ligeramente mayor. Para compensar el incremento en densidad la velocidad axial debe disminuir para que el flujo másico se mantenga constante.

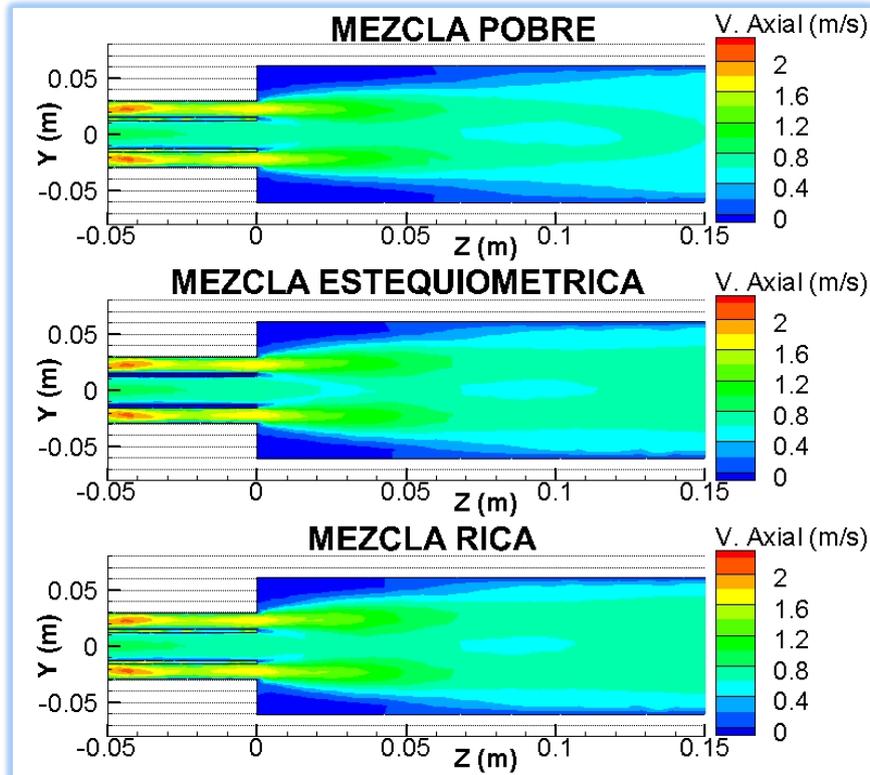


Figura 5. 1 Contornos de velocidad axial para los tres tipos de mezcla

Para analizar el proceso de combustión se representan los contornos de fracción másica de agua, ya que como se explicó anteriormente proporcionan información directa sobre el proceso de combustión. En la Figura 5.7 se observa que la cantidad de agua en el caso de mezcla estequiométrica y en el de la mezcla rica son muy similares aunque no llegan a ser iguales. En el caso de mezcla pobre, como era de esperar la cantidad de agua es mucho menor. En teoría no debería haber diferencias entre la cantidad de agua en la mezcla estequiométrica y la rica ya que, como se ha explicado antes la cantidad de metano que se quema en ambas es la cantidad máxima que se puede quemar con el oxígeno inyectado. Las diferencias son causadas por dos razones:

- Inexactitud del flujo másico de las mezclas a la entrada como se expuso en el capítulo 3.
- Falta de homogeneidad de la mezcla debido a un mezclado no perfecto en el caso de la mezcla estequiométrica. Al ser imposible obtener un mezclado perfecto con el método de inyección que se utiliza, en el caso de mezcla rica

siempre va a haber más celdas con la cantidad estequiométrica de metano que en el caso de mezcla estequiométrica.

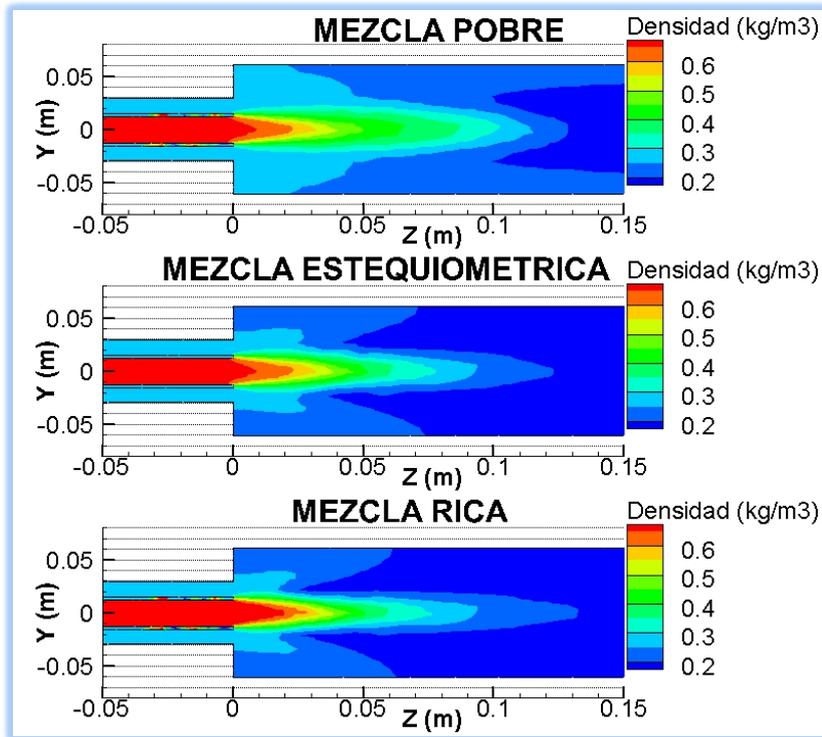


Figura 5. 2 Contornos de densidad para los tres tipos de mezcla

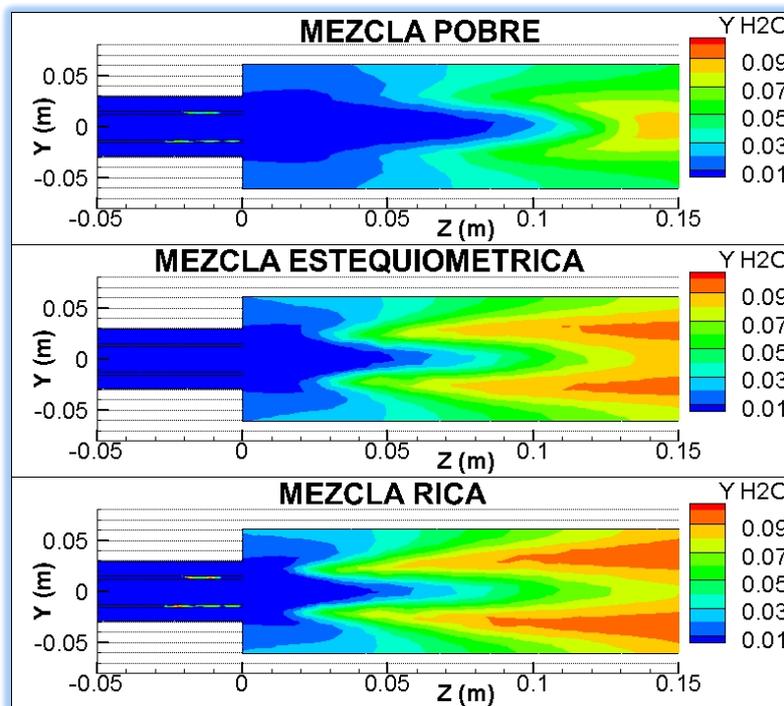


Figura 5. 3 Contornos de fracción másica de agua para los tres tipos de mezcla.

Como se observa en la Figura 5.8 la cantidad de agua al inicio del quemador es muy similar para los tres casos, cabe destacar que la gran mayoría del agua disponible se encuentra en los extremos del quemador. Esto se debe a que cuando se produce la inyección el mezclado se ve favorecido por el movimiento de swirl del comburente.

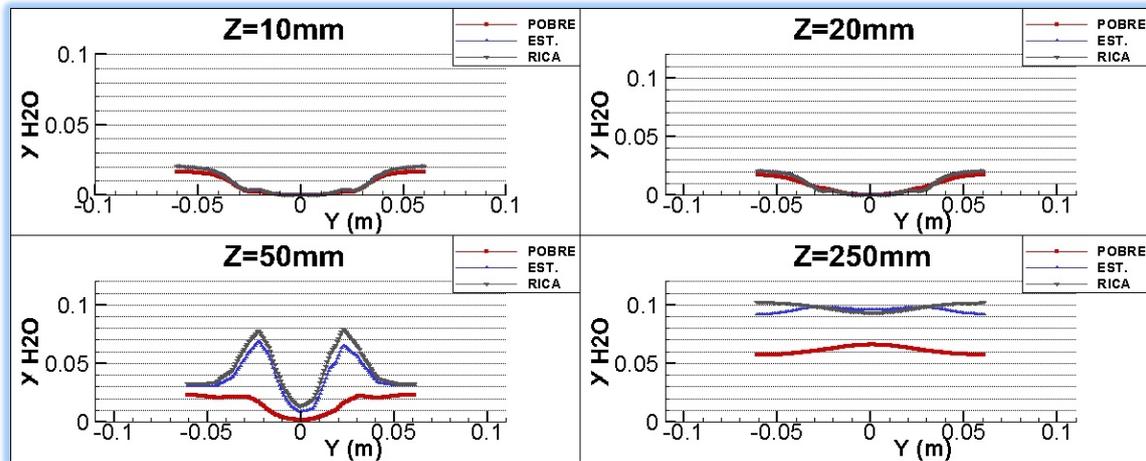


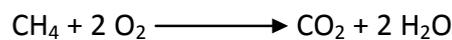
Figura 5. 8 Gráficas de la fracción másica de agua en función de la coordenada radial para cuatro planos $Z=constante$

En la Figura 5.9 se puede visualizar la concentración inicial del agua en los extremos del quemador. Desde el inicio se observa que la cantidad de agua es ligeramente mayor en la mezcla rica que en la estequiométrica, hasta que se estabilizan los perfiles ($Z=250mm$) y se puede comprobar lo esperado, aunque la cantidad de combustible sea distinta, al final en ambos casos se quema la misma cantidad y por consiguiente se produce la misma cantidad de agua. Se observa también la notable menor cantidad de agua producida en el caso de mezcla

La tasa neta de reacción de agua es una variable muy útil para conocer donde se está produciendo la combustión. En la representación de la Figura 5.10 se observa en las gráficas iniciales la notable tasa superior en la mezcla rica. Esto se debe, como se ha explicado antes, a que el combustible está más disponible que en los otros casos por la simple razón de que hay más. Pero al estar más disponible se quema más inicialmente pero el oxígeno, que en el caso de la mezcla rica es la especie limitante, se agotará antes. Esto se manifiesta en la gráfica de $Z=50mm$, debido a la alta tasa de reacción que se ha dado anteriormente en la mezcla rica, el oxígeno empieza a escasear. Pero en la mezcla estequiométrica, como anteriormente el combustible estaba menos disponible para mezclarse con el oxígeno y quemarse, ahora se quema más que en el caso de la mezcla rica. Lo mismo sucede en el caso de la mezcla estequiométrica. Este caso es más peculiar ya que tanto el metano como el oxígeno al estar en proporciones estequiométricas son ambos los factores limitantes. Posteriormente a la altura $Z=100mm$, como en las mezclas rica y estequiométrica ha habido altas tasas de

reacción las especies limitantes se han ido agotando, en cambio en la mezcla pobre, como la concentración de metano en el combustible era menor no ha habido tasas altas y ahora hay mayor disponibilidad y por consiguiente se obtiene una tasa de reacción mucho mayor que en las mezclas estequiométrica y rica. pobre debido a la menor cantidad de combustible.

Los mismos sucesos se pueden visualizar con la especie CO₂. Según la ecuación estequiométrica de la combustión de metano (Ec 5.1) ambas especies son productos de la combustión, aunque como se puede observar se dan en diferentes proporciones. En la Figura 5.10 se representan los contornos de fracción másica de CO₂ que como se puede observar, los valores de fracción másica no son el doble que los de agua (representados en la Figuras 5.7 y 5.8) como se podría esperar al observar la ecuación estequiométrica. Esto es debido a que el CO₂ tiene un peso molecular mucho mayor que el del agua (46 g/mol del CO₂ frente a 18 g/mol del agua), esto produce que la producción de CO₂ sea mayor. Al ser ambos productos directos de la combustión de metano los contornos son muy similares en forma como se puede observar al comparar las Figuras 5.10 y 5.7.



Ec 5.1

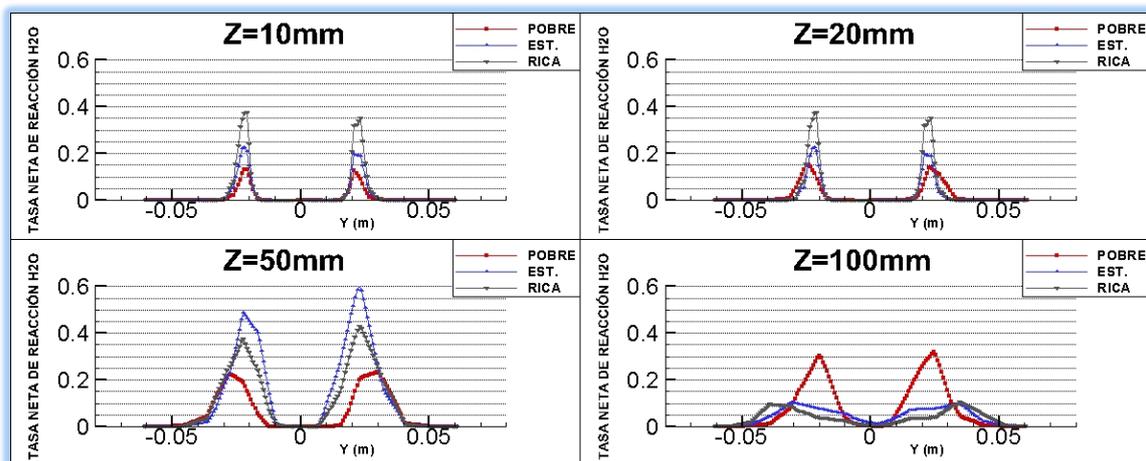


Figura 5. 9 Gráficas de la tasa neta de reacción de agua en función de la coordenada radial para cuatro planos Z=constante

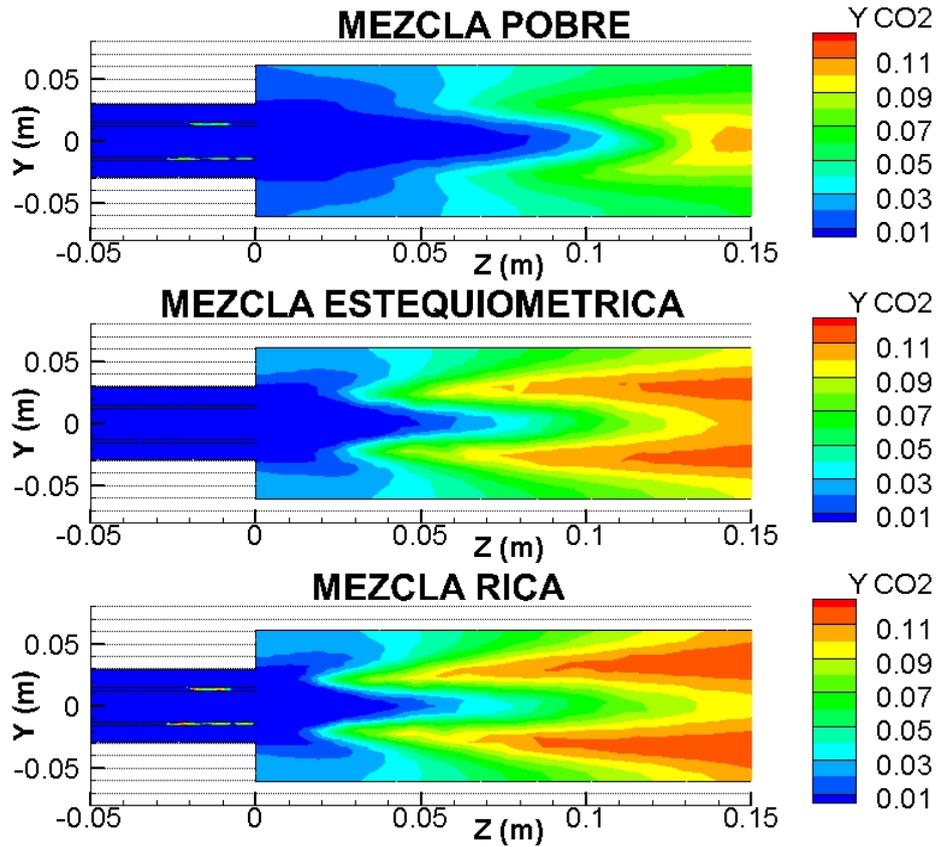


Figura 5. 10 Contornos de fracción másica de CO₂ de las tres mezclas

La producción de CO₂ es una variable interesante ya que está considerada como especie contaminante y sus emisiones están restringidas por ley [Boushaki, 2017]. En la Figura 5.11 se observa la tasa neta de producción de CO₂. Como se puede observar ocurre lo mismo que cuando se analizó la tasa neta de reacción de agua (Figura 5.9), en el inicio se produce una mayor cantidad de CO₂ en la mezcla rica porque está más disponible en combustible, pero a menudo que avanza la mezcla como se ha quemado una mayor tasa de combustible en la rica cuando se llega a $Z=50\text{mm}$ es la mezcla rica la que más combustible está quemando y en $X=100$ es la pobre porque las otras dos han agotado la mayor parte del combustible. Se puede observar que los valores difieren ligeramente de los de la tasa de producción de agua. Esto se debe a lo explicado anteriormente sobre las diferencias en peso molecular.

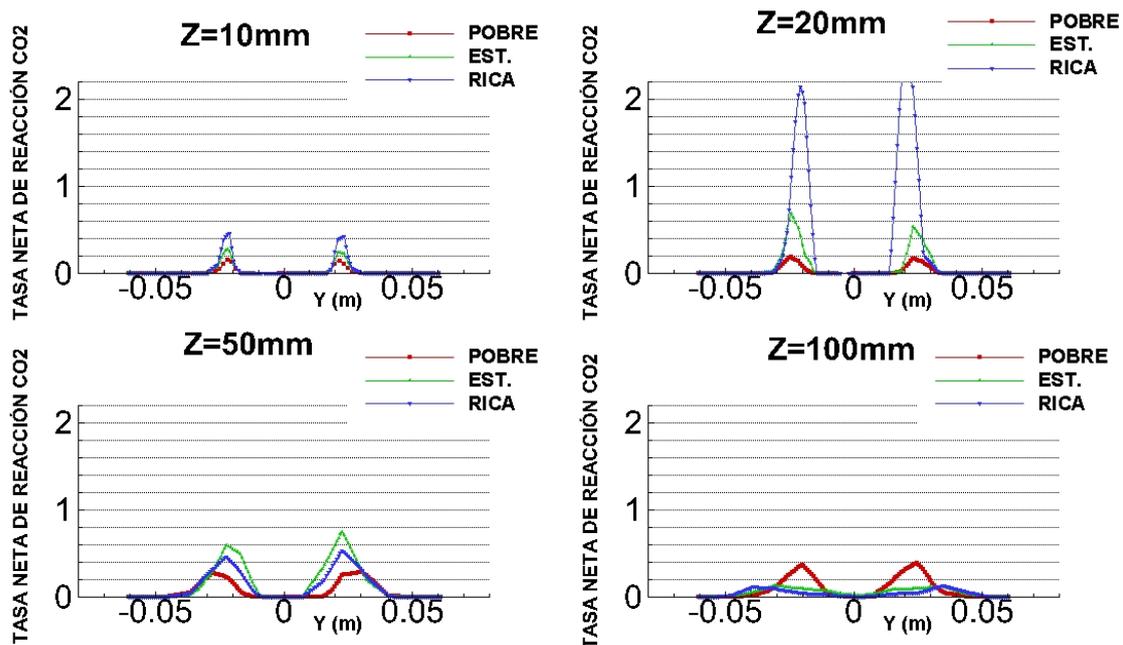


Figura 5. 10 Gráficas de la tasa neta de reacción de agua en función de la coordenada radial para cuatro planos $Z=$ constante

En los contornos de temperatura se ve reflejado lo analizado anteriormente. En las Figuras 5.11 y 5.12 se observa que los contornos de temperatura siguen una forma similar a los contornos de densidad, fracción másica de H₂O, etc. Todas estas variables van en función de la combustión, ya que en el inicio (antes de la inyección) los tres casos tienen las mismas condiciones de temperatura, velocidad, composición, etc. Es cuando se produce la combustión que las variables cambian, y como se ha observado a lo largo del capítulo, la combustión es dependiente del mezclado. Así que con esa razón los contornos de temperatura son muy similares en la mezcla rica y la estequiométrica. Siendo ligeramente más altas en la mezcla rica debido a la abundancia de combustible.

5.3 CONCLUSIONES

De lo estudiado en este capítulo se puede concluir que el dosado tiene un papel muy importante en el desarrollo de la combustión. Según se aumenta el dosado se producirá una mayor combustión y más rápida, pero una vez superado el dosado estequiométrico estos incrementos son menores.

Con un dosado pobre la combustión se retrasa pero hay seguridad de que se quemará la totalidad del combustible. Las temperaturas alcanzadas serán menores pero la energía liberada será igual siempre y cuando la cantidad de combustible quemado sea igual. Con la mejora del mezclado se mejora sustancialmente la combustión. Un buen

mezclado puede suponer un ahorro en combustible ya que se pueden conseguir resultados similares a los que se obtendrían con un dosado mayor.

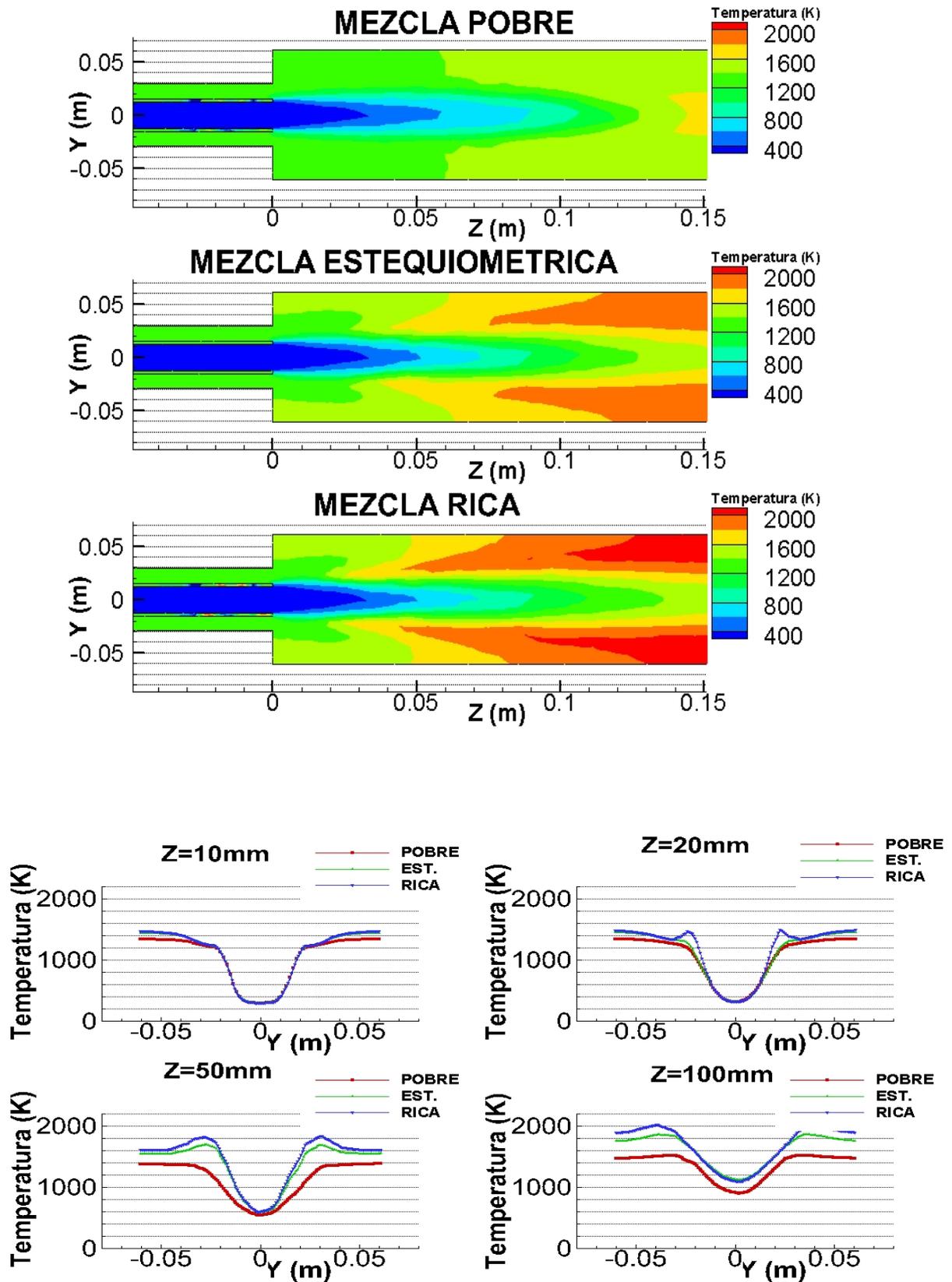


Figura 5.12 Gráficas de la temperatura en función de la coordenada radial en diferentes planos $Z=\text{constante}$

6 CAPÍTULO

CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

6.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se recogerán las conclusiones obtenidas del trabajo realizado y para concluir se expondrán las líneas de trabajo para futuras investigaciones que por falta de tiempo o de recursos no se han podido llevar a cabo durante la realización de este TFG.

6.2 CONCLUSIONES

- 1- Del estudio de los patrones de flujo se ha observado que bajo las condiciones que se han llevado a cabo los experimentos y con la geometría de quemador específica del experimento de Roback y Johnson no se produce IRZ para ningún caso reactivo ni de mezcla debido a que el número de Swirl es menor de 0,6 [Parra et al., 2015]. Sí que se produce en todos los casos ORZ producida por el movimiento de Swirl del fluido. La zona de recirculación externa ayuda a mejorar la mezcla [Roback et al. 1985] con lo cual se puede concluir que la presencia de los álabes mejora el proceso de combustión, pero aumentando ligeramente el número de Swirl se podría llegar a conseguir IRZ que ayudaría con la estabilidad de la llama.
- 2- El aditivo formado por cuatro moléculas de helio (tipo 1), que es el que se ha pretendido introducir en este trabajo como sustitución del aditivo con las mismas propiedades que el metano (tipo 2) no da los mismos resultados, especialmente cuando se habla de resultados dinámicos. Sin embargo el resultado global de la combustión es el mismo en ambos casos, así como los resultados cinemáticos, que son prácticamente indistinguibles entre ambos casos. Así que, en caso de la utilización del aditivo de tipo 1 se deberá prestar atención a las zonas iniciales del quemador, especialmente a las propiedades relacionadas con la densidad. Pero se puede asegurar con confianza que el resultado final de la combustión será igual que el obtenido con el aditivo de tipo 2.
- 3- Al evaluar al helio como sustituto del aditivo de tipo 2 se concluye que no se obtienen resultados parecidos entre estas dos sustancias. Pero al crear una sustancia con propiedades intermedias entre ambos (aditivo de tipo 1) se han observado múltiples similitudes en los resultados. Con esto se puede concluir que el aditivo de tipo 1 puede ser usado como sustituto del aditivo de tipo 2 para otros experimentos computacionales siempre y cuando se tengan en cuenta las diferencias que surgen como por ejemplo la variación de calor específico de la mezcla. En el caso de usar helio como aditivo las diferencias son demasiado grandes como para poder considerarlo como un sustituto aceptable debido fundamentalmente a los radicales cambios de densidad que provoca al tener unas propiedades físicas tan diferentes a las del metano.

- 4- A partir del estudio del flujo másico se ha observado que las condiciones de contorno impuestas no se traducen con exactitud en el modelo computacional debido a las pérdidas que se producen por el rozamiento del flujo con las paredes de las toberas. Se concluye que el tratamiento de pared elegido influye tanto en la forma de los perfiles de velocidad (o de cantidad de movimiento) como en la velocidad media de entrada que, en este caso no se ajusta al 100% con la impuesta.
- 5- El modelo de combustión tiene una significativa influencia sobre los resultados obtenidos. El modelo que mejor se adecúa a los resultados ideales es el EDC, que no solo proporciona unos resultados considerablemente mejores que el PDF si no que tiene que se aproximan en gran medida a los resultados ideales.
- 6- La influencia del dosado se ha observado que es significativa. En las mezclas con un dosado pobre las temperaturas resultantes son considerablemente menores que en el caso de dosado estequiométrico o dosado rico. Entre estos dos últimos casos, como era de esperar, se han observado mayores temperaturas en el caso de dosado rico pero la diferencia ha sido muy ligera. Se ha concluido que tanto el dosado como la eficacia del mezclado tienen una gran influencia en el proceso de combustión.

En cuanto a los software utilizados se ha concluido:

- 1- Para el post-proceso de los datos experimentales obtenidos por Fluent resulta más eficiente exportarlos en formato .cgns ya que éste proporciona la totalidad de las variables obtenidas, sin errores las variables exportadas, al contrario que el formato .dat.
- 2- Para los experimentos llevados a cabo ha sido necesario eliminar la función de multigrid ya que llevaba a errores con el número de Courant.
En los modelos simulados con PDF es necesario modificar el límite de flamabilidad que viene especificado por defecto, especialmente en los casos con dosado rico, para que se permita el proceso de detonación.
- 3- En el caso de exportar datos de Fluent a Tecplot en formato .tec es necesario modificar en el archivo de texto el tipo de celdas a tetraédricas ya que por defecto se exporta mal y produce errores en tecplot.

6.3 TRABAJOS FUTUROS

Para próximos trabajos en el mismo área de investigación se propone estudiar el efecto de los tratamientos de pared y de la malla sobre los patrones de flujo que se obtienen. También el estudio de las diferencias entre los patrones con flujo reactivo y no reactivo. Ligado a los tratamientos de pared y de malla está el estudio del flujo por medio de la variación del Swirl. Aumentando el número de Swirl se puede llegar a

obtener IRZ lo que supondrá una mayor estabilidad de llama y cambiará radicalmente los patrones de flujo observados en el interior del quemador.

Otro tipo de investigación que se propone es el estudio de la influencia de otros aditivos no inertes y compararlos con los aditivos inertes estudiados en este trabajo. Algún ejemplo de éstos son los aditivos usados en la industria como el nitrógeno o el amoníaco.

La influencia del dosado puede llegar a ser estudiada más profundamente observando la influencia que tiene en un rango mayor de variación. A partir del estudio del dosado se propone investigar el rendimiento de la combustión en cada caso.

Se propone profundizar en el modelo PDF ya que requiere un tiempo de computación mucho menor que el EDC. Conociendo los buenos resultados que se obtienen con el modelo EDC se puede utilizar como validación del modelo PDF. Los resultados de experimentos simulados con PDF a menudo dan errores ocasionados por razones ajenas al modelo de combustión. Con una investigación centrada en este modelo de combustión es posible que se obtenga una herramienta de simulación mucho más rápida y que proporcione unos resultados similares.

REFERENCIAS

Benim A. C., Iqbal S., Meier W., Joos F., Wiedermann A., "Numerical investigation of turbulent swirling flames with validation in a gas turbine model combustor", *Applied Thermal Engineering*, 110 (2017), 202-212.

Bhuiyan A. A., Naseer J., "Thermal characterization of coal/straw combustion under air/oxy-fuel conditions in a swirl-stabilized furnace: A CFD modeling", *Applied Thermal Engineering*, 93 (2016), 639-650.

BOE-A-2007-19744, 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.

Boushaki T., Merlo N., Chauveau C., Gökalp I., "Study of pollutant emissions and dynamics of non-premixed turbulent oxygen enriched flames from a swirl burner", *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2017), 3959-3968.

Bray K. N. C., Champion M., Libby P.A., Swaminathan N., "Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 146 (2006), 665-673.

Crespo A., "Mecánica de Fluidos", Editorial Paraninfo, 2006, ISBN: 8497322924.

Escorial A. G., "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.

García J. M., "Análisis de las emisiones de un quemador de metano con flujo rotante mediante CFD", TFG, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (Spain), 2016.

Ilbas M., Karyeyen S., "An experimental and numerical study on turbulent combustion of hydrogen-rich coal gases in a generated non-premixed burner", *Fuel*, 194 (2017) 274-290.

Jones W.P., Whitelaw J.H., *Combustion and Flame*, 48 (1982), 1-322

Oh J., Noh D., Ko C., "The effect of hydrogen addition on the flame behavior of a non-premixed oxy-methane jet in a lab-scale furnace", *Energy*, 62 (2013), 362-369.

Parra-Santos M. T., Mendoza-García V., Szasz R., Gutkowski A. N., Castro-Ruiz F., "Influence of Flow Swirling on the Aerothermodynamic Behaviour of Flames", *Fizika Goreniya i Vzryva*, 51 (2015), 29-36.

Poinsot T., "Prediction and control of combustion instabilities in real engines", *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2017) 1-28

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

Urueña D., "Simulación de mezcla y combustión en quemadores con flujo rotante", TFG, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (Spain), 2014.

Valera/Medina A., Marsh R., Runyon J., Pugh D., Beasley P., Hughes T., Bowen P., "Ammonia-methane combustión in tangential swirl burners for gas turbine power generation", *Applied Energy*, 185 (2017), 1362-1371.

Wendt J., "Computational Fluid Dynamics", Editorial Springer, 2009, ISBN 978-3-540-85056-4

Yin Z., Nau P., Meier W., "Responses of combustor surface temperature to flame shape transitions in a turbulent bi-stable swirl flame", *Experimental Thermal and Fluid Science*, 82 (2017), 50-57

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

Zhou H., Yang Y., Wang L., "Numerical investigation of gas-particle flow in the primary air pipe of a low NO_x swirl burner – The DEM-CFD method", *Particuology*, 19 (2015), 133-140.

<http://www.atmosferis.com/funcionamiento-y-caracteristicas-constructivas-de-las-camaras-de-combustion-en-turbinas-de-gas/>

(Última visita: 20/06/2017)

http://www.bp.com/es_es/spain/prensa/notas-de-prensa/2016/bp-statistical-review-world-energy-2016.html

(Última visita: 20/06/2017)

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

(Última visita: 20/06/2017)

http://www.ehu.es/rperez/Fisicabio/docs/densidad_visco.pdf

(Última visita: 20/06/2017)

<http://www.greenpeace.org/usa/global-warming/issues/fracking/>

(Última visita: 20/06/2017)

<http://www.kostic.niu.edu/DNS-CFD-NS-Turbulence.htm>

(Última visita: 20/06/2017)

http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/1015/mod_resource/content/1/1C_C12757_0910/04_GT17_Reduccion_de_NOX_en_humos.pdf

(Última visita: 20/06/2017)

http://politica.elpais.com/politica/2017/03/12/actualidad/1489327921_945088.html

(Última visita: 20/06/2017)

<https://www.rose-hulman.edu/~rickert/Classes/ma331/statint.pdf>

(Última visita: 20/06/2017)

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

(Última visita: 20/06/2017)

https://en.wikipedia.org/wiki/Reynolds-averaged_Navier%E2%80%93Stokes_equations

(Última visita: 21/06/2017)

ANEXO

Fluent

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

Release: 14.5.7

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	Reacting (6 species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Disabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

Material Properties

Material: (helium . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	5193
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3117.7102
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	126029.45
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: helium (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.66000003

Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	5193
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.152
Viscosity	kg/m-s	constant	1.9900001e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3117.7102
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	126029.45
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: h2c4o (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 605.51136 1.653806 0.00012416234 -7.7035709e-07 2.0641163e-10) (1000-4000: 1292.4465 0.61623382 - 6.1483882e-05 -3.4090155e-08 6.427714e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	66.05994
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.2840674e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	277960.2
Reference Temperature	k	constant	298
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: methane-air (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species	names		((ch4 o2 co2 h2o he n2) () ())
Reaction	finite-rate		((reaction-1 ((ch4 1 0.2 1) (o2 2 1.3 1)) ((co2 1 0 1) (h2o 2 0 1)) ()) (stoichiometry 1ch4 + 2o2 --> 1co2 + 2h2o) (arrhenius 2.119e+11 2.027e+08 0) (mixing-rate 4 0.5) (specified-rate-exponents? . #t) (use-third-body-efficiencies? . #f)))
Mechanism	reaction-mechs		((mechanism-1 (reaction-type . all) (reaction-list reaction-1) (site-info)))
Density	kg/m3	incompressible-ideal-gas	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.045400001
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05

Mass Diffusivity	m ² /s	constant-dilute-appx	(2.8799999e-05)
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (nitrogen . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04303 0.41796389 - 0.001176279 1.674394e-06 -7.2562972e-10) (1000-5000: 868.62292 0.44162953 - 0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.013399
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.78
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: nitrogen (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m ³	constant	1.138
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1040.67
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0242
Viscosity	kg/m-s	constant	1.663e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.78
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (water-vapor . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.077 1.603755 - 0.0029327839 3.216101e-06 -1.156827e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 - 0.0004029141 5.5427719e-08 -2.949824e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.015341
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: water-vapor (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	constant	0.5542
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	2014
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0261
Viscosity	kg/m-s	constant	1.34e-05
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
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#

Material: (carbon-dioxide . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.92889 1.874473 - 0.0019664851 1.2972509e-06 -3.9999559e-10) (1000-5000: 841.37646 0.59323931 - 0.00024151675 4.5227278e-08 -3.1531301e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.009949
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9353235e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#

Material: carbon-dioxide (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	constant	1.7878
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	840.37
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0145
Viscosity	kg/m-s	constant	1.37e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.00995
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9353235e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#

Material: (oxygen . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82648 0.29295799 - 0.0001495637 3.413885e-07 -2.2783581e-10) (1000-5000: 960.75232 0.15941258 - 3.2708853e-05 4.6127648e-09 -2.9528325e-13)
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: oxygen (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.2999
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	919.31
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0246
Viscosity	kg/m-s	constant	1.919e-05
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
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (methane . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 - 0.01442509 1.580519e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 - 0.0020082949 3.5166462e-07 -2.3339101e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: methane (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.6679
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	2222
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0332
Viscosity	kg/m-s	constant	1.087e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
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

Cell Zone Conditions

Zones

name	id	type
zone1	3	fluid

Setup Conditions

zone1

Condition	Value
Material Name	methane-air
Specify source terms?	no
Source Terms	()
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Fixed Values	()
Frame Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)	0

Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Reference Frame Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Reference Frame Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Reference Frame X-Component of Rotation-Axis	0	
Reference Frame Y-Component of Rotation-Axis	0	
Reference Frame Z-Component of Rotation-Axis	1	
Reference Frame User Defined Zone Motion Function		none
Mesh Motion?	no	
Relative To Cell Zone	-1	
Moving Mesh Rotation Speed (rad/s)	0	
Moving Mesh X-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Moving Mesh Y-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Moving Mesh Z-Velocity Of Zone (m/s)	0	
Moving Mesh X-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Moving Mesh Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0	
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis	0	
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis	0	
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis	1	
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function		none
Deactivated Thread	no	
Laminar zone?	no	
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?		yes
Embedded Subgrid-Scale Model	0	
Momentum Spatial Discretization	0	
Cwale	0.325	
Cs	0.1	
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?	yes
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?	no
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
Equilibrium Thermal Model (if no, Non-Equilibrium)?	yes
Non-Equilibrium Thermal Model?	no
Solid Material Name	aluminum
Interfacial Area Density (1/m)	1
Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	1
Reaction Mechanism	0
Activate reaction mechanisms?	yes
Surface-Volume-Ratio (1/m)	0

Boundary Conditions

Zones

name	id	type

wall-1	1	wall
velocity-inlet	6	velocity-inlet
air-inlet	7	velocity-inlet
outlet	8	pressure-outlet

Setup Conditions

wall-1

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
	(0 0 0 0 0)
	((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile))
	((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile))
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
Fslip constant	0
Eslip constant	0
Surface tension gradient (n/m-k)	0
Specularity Coefficient	0
Convective Augmentation Factor	1

velocity-inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0

```

Velocity Magnitude (m/s)          0.66000003
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal) 0
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 (%)            12
Turbulent Length Scale (m)         1
Hydraulic Diameter (m)             0.024
Turbulent Viscosity Ratio          10
Specify Species in Mole Fractions? no
                                   (((constant . 0.234) (profile )) ((constant . 0) (profile ))
((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.76599997) (profile )))
is zone used in mixing-plane model? no

```

air-inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
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)                    1200
Turbulent Specification Method      3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)   1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3) 1
Turbulent Intensity (%)            7.4999996
Turbulent Length Scale (m)         1
Hydraulic Diameter (m)             0.028
Turbulent Viscosity Ratio          10
Specify Species in Mole Fractions? no
                                   (((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.22) (profile )))
((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
is zone used in mixing-plane model? no

```

outlet

Condition	Value
Gauge Pressure (pascal)	0
Backflow Total Temperature (k)	300
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	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
Turbulent Specification Method	0
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	10
Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10

```

Specify Species in Mole Fractions?      no
Backflow                               (((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile
)) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
is zone used in mixing-plane model?    no
Radial Equilibrium Pressure Distribution  no
Specify Average Pressure Specification  no
Specify targeted mass flow rate        no
Targeted mass flow (kg/s)              1
Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal) 5000000
Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal) 1

```

Solver Settings

Equations

Equation	Solved

Flow	yes
Turbulence	yes
ch4	yes
o2	yes
co2	yes
h2o	yes
he	yes
Energy	yes

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
ch4	1

o2	1
co2	1
h2o	1
he	1
Energy	1

Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Tolerance	Reduction

Pressure	V-Cycle	0.1		
X-Momentum	Flexible	0.1	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.1	0.7
ch4	Flexible	0.1	0.1	0.7
o2	Flexible	0.1	0.1	0.7
co2	Flexible	0.1	0.1	0.7
h2o	Flexible	0.1	0.1	0.7
he	Flexible	0.1	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	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
ch4	Second Order Upwind
o2	Second Order Upwind
co2	Second Order Upwind
h2o	Second Order Upwind
he	Second Order Upwind
Energy	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