



UNIVERSIDAD DE VALLADOLID



ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

GRADUADO EN INGENIERÍA MECÁNICA

TRABAJO FIN DE GRADO

ESTUDIO DE LA COMBUSTIÓN EN CFD CON
VARIACIÓN DE LOS MODELOS DE
COMBUSTIÓN, DOSADO Y TEMPERATURA

Álvaro Gómez Escorial

Valladolid, 2015

Tutor:

Parra Santos, María Teresa

Dpto. Ingeniería Energética y Fluidomecánica

Me gustaría dedicar este trabajo a mis padres por todo el esfuerzo a todos los niveles que han hecho para que yo pudiese estudiar y llegar a donde estoy. A todos mis amigos por su cariño y a la gente que ha estado presente en mi camino ayudandome. A mi tutora por toda la dedicación y trabajo que ha realizado todos los días para que pudiese hacer este trabajo.

Muchas gracias.

Acrónimos

CFD (*Computational Fluid Dynamics*)

DNS (Direct Numerical Simulation)

LES (Large Eddy Simulation)

RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)

PDF (Probability Density Function) *Función Densidad de Probabilidad*

ED (Eddy-Disipación)

PVC Precessing Vortex Core

ZRI centro de rotación interior

ZRE centro de rotación exterior

MFV Mixture Fraction Variance

Φ dosado relativo del combustible

Índice:

1	Capítulo	11
1.1	Presentación	13
1.2	Justificación	13
1.3	Objetivos	14
2	Capítulo	17
2.1	Introducción	19
2.2	Modelo físico	19
2.2.1	Definición del número de swirl:	20
2.3	Modelo numérico	21
2.3.1	Características del flujo y del fluido	21
2.3.2	Características de la malla	22
2.3.3	Modelo computacional	24
2.3.3.1	Etapas de resolución	24
2.3.3.2	Método de volúmenes finitos	25
2.3.4	Modelo de turbulencia	26
2.3.4.1	DNS (Direct Numerical Simulation)	26
2.3.4.2	LES (Large Eddy Simulation)	27
2.3.4.3	RANS (Reynolds Averaged Navier Stoke)	28
2.3.4.4	Elección modelo de turbulencia	29
2.3.5	Modelo k- ϵ RNG	30
2.3.6	Modelos para combustión	31
2.3.6.1	PDF (Probability Density Function)	31
2.3.6.2	ED (Eddy-Disipación)	33
2.3.6.3	EDC (Eddy-Dissipation-Concept)	33
2.4	Conclusiones	34
3	Capítulo	35
3.1	Validación del modelo de turbulencia	37
3.2	Combustión del modelo PDF	42
3.3	Refinamiento de la malla	45
4	Capítulo	51
4.1	Efecto del difusor en la mezcla y en la combustión	53
4.1.1	Caso de mezcla	53
4.1.2	Caso combustión	56

4.1.3	Comparación combustión y mezcla.....	59
4.1.3.1	Con difusor	59
4.1.3.2	Sin difusor.....	60
4.2	Modelo de combustión ED	61
4.3	Modelo de combustión EDC.....	63
5	Capítulo	65
5.1	Influencia de la temperatura del combustible en la combustión.....	67
5.2	Efecto del dosado en la combustión.....	73
5.2.1	Sin difusor	74
5.2.2	Con difusor	76
6	Capítulo	79
6.1	Conclusiones.....	81
6.2	Futuros trabajos.....	82
7	Capítulo	83
7.1	Referencias.....	85
8	Capítulo	89
8.1	Publicaciones	91
8.2	Resumen Trabajo Fin de Grado	92
8.3	Summary.....	98

1 Capítulo

INTRODUCCIÓN

1.1 PRESENTACIÓN

En este capítulo se presenta los objetivos de este Trabajo Fin de Grado, su motivación y las aplicaciones que puede tener. También se muestra una breve descripción de los siguientes capítulos que servirá como hilo conductor de la memoria.

Este trabajo se basa en el estudio computacional del comportamiento del flujo a lo largo de una cámara de combustión cuando el flujo entrante posee rotación.

En la actualidad el uso de quemadores está extendido a muchos sectores industriales, tales como altos hornos siderúrgicos y producción de electricidad y calor entre otros (Waganoff, 1963). También hay que mencionar que el estudio computacional de la combustión en motores está muy extendido y los parámetros para mejorar la eficiencia y reducir los productos contaminantes son los mismos que para quemadores convencionales.

Los combustibles que admiten el tipo de quemador que se utiliza en este trabajo son gaseosos. En el caso de combustibles líquidos se requieren modelos de evaporación (cambio de fase) y rotura de chorro de gotas. En este caso será gaseoso ya que se empleará una mezcla de metano.

1.2 JUSTIFICACIÓN

Hay que tener en cuenta que para adaptarse a la normativa europea los quemadores tienen que cumplir una serie de leyes ambientales, para ello habrá que tener en cuenta los productos de la combustión producidos.

Los métodos que se han empleado para la regulación de las emisiones en este trabajo son la modificación de la llama según las características del combustible, las condiciones iniciales del oxidante y combustible así como las distintas geometrías del quemador.

El principal producto de la combustión es el CO_2 . Gracias a las mejoras realizadas en los últimos años en quemadores y en los componentes de los combustibles se ha conseguido emisiones relativamente bajas de CO_2 . Esto se justifica, por ejemplo, con el estudio de algunos métodos muy prometedores como la tecnología Chemical-Loop Combustion que se aplica en combustibles gaseosos para la captura del CO_2 , la cual consiste en la transferencia de O_2 del aire al combustible gracias a un óxido metálico como el níquel

cuya función es la de transportador de oxígeno evitando así el contacto directo entre el aire y el combustible gaseoso. (Huerta, 2012)

La generación de CO en turbinas de gas no es un problema debido a que la combustión es casi perfecta con altos rendimientos.

1.3 OBJETIVOS

Los quemadores empleados en este trabajo se basan en los diseños de Roback y Johnson (Roback, 1983). La combustión de este tipo de quemadores está regida por el comportamiento del flujo debido a las recirculaciones que se producen por la interacción del propio flujo y por la geometría de dicho quemador.

Por tanto se estudiará el comportamiento del flujo de manera computacional, para ello se tendrá tendremos que seleccionar un modelo numérico que se adapte a la situación que se quiere aplicar.

Los objetivos de este Trabajo Fin de Grado son:

- Estudio del patrón de flujo del quemador.
- Búsqueda de un modelo de combustión óptimo.
- Métodos de reducción de los productos de la combustión.

La estructura con la que cuenta este trabajo es:

- En el capítulo 1 se introduce y presenta el trabajo.
- En el capítulo 2 se incluyen el modelo físico y numérico del quemador así como la justificación de la utilización de cada uno de ellos.
- En el capítulo 3 se verifican los resultados del modelo de turbulencia obtenidos computacionalmente con los experimentales de Roback y Johnson (Roback, 1983), el estudio del refinamiento de la malla y el modelo PDF que se empleará en combustión.
- En el capítulo 4 se analiza el uso del difusor en la mezcla y en la combustión a la vez que otros métodos de combustión tales como el modelo ED y EDC.
- En el capítulo 5 se estudia el efecto de variar la temperatura del combustible además de la variación del dosado.
- En el capítulo 6 se dan las conclusiones a las que se llega después de los análisis computacionales realizados para este trabajo.

- Para finalizar se muestra la bibliografía empleada y un anexo con el resumen de todas las opciones seleccionadas en el modelo numérico.

2 Capítulo

MODELO FÍSICO Y NUMÉRICO

2.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se describe el desarrollo teórico en el que se basan los distintos casos computacionales se describen los pasos seguidos para realizar los ensayos. Para ello se tratará de simular el comportamiento del flujo de una mezcla de combustible con oxidante en una cámara de combustión. Se realizará de tal manera que se mezclen ambos compuestos, hay que mencionar que su estado es gaseoso, incompresible y en flujo estacionario.

Para ello se necesita conocer el dominio físico por donde se van a mover los fluidos, las condiciones iniciales y las ecuaciones que se utilizaran para su simulación.

2.2 MODELO FÍSICO

El modelo geométrico utilizado en este proyecto corresponde al quemador diseñado por Roback y Johnson (Roback, 1983). La elección de este tipo de quemador es debida a la información disponible y contrastada que hay acerca de este diseño. Se han utilizado dos quemadores, uno sin difusor como en el caso de Roback y Johnson que se empleará para validar los resultados obtenidos por computación y otro con difusor, es decir, la geometría inicial del quemador tiene sección variable. Este último caso no se puede comparar con los datos de Roback y Johnson pero sí que se podrán comparar los datos computacionales de ambos modelos.

El modelo del quemador es axisimétrico, y constará de dos partes claramente diferenciadas. El diseño de la cámara de combustión, consta de:

- a. Dos cilindros concéntricos por donde se añadirán el combustible y el oxidante a la cámara de combustión, ambos con longitud de 94 mm, con diámetros de 25 mm para el interior. El tubo exterior tiene diámetros interior y exterior de 31 mm y 59 mm respectivamente.
- b. El quemador es un cilindro de 122 mm de diámetro y 1016 mm de longitud, en donde se mezclan los dos fluidos y posteriormente se queman. En el caso del cilindro con difusor la pared de entrada es un cono con un semiángulo de 60°.
- c. Hay ocho alabes fijos dentro del cilindro concéntrico de mayor diámetro, se sitúan en los 50 mm aguas arriba de la descarga.

La representación se muestra en las *Figura 2. 1* y *Figura 2. 2*.

Con los alabes fijos se consigue modificar el swirl, con lo que se aumenta la turbulencia y se mejora la homogeneidad de la mezcla.

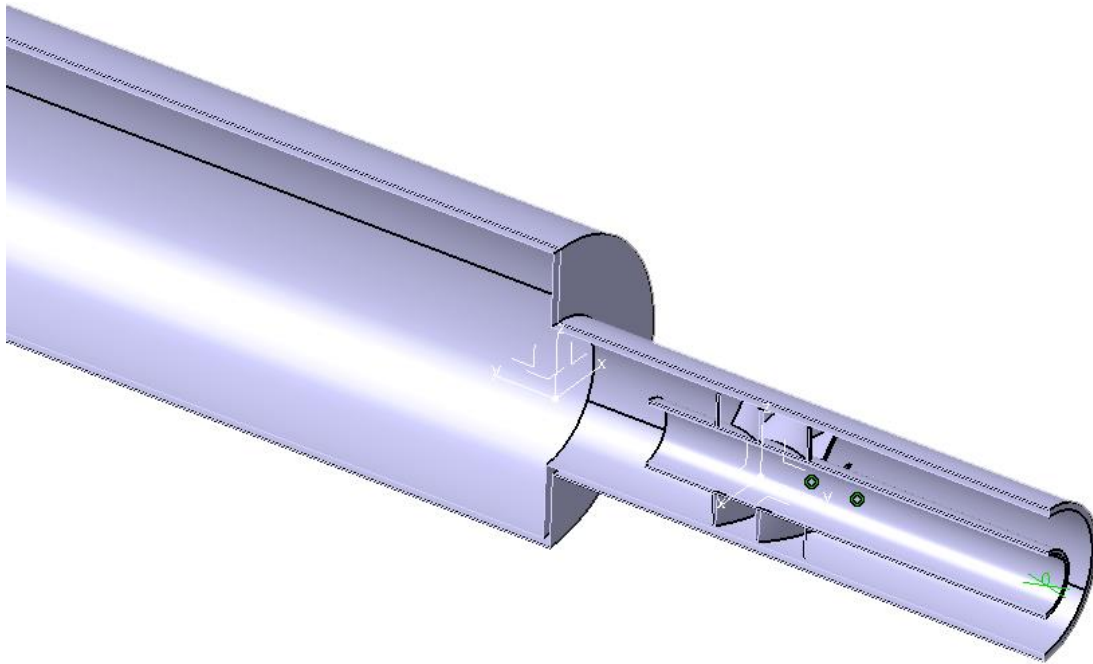


Figura 2. 1 Modelo sin difusor.

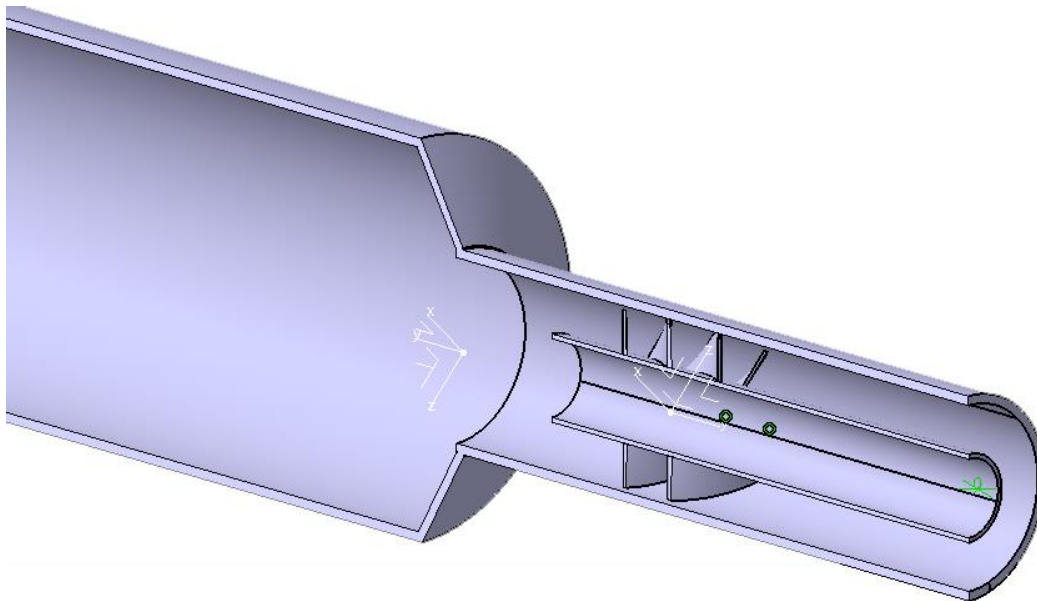


Figura 2. 2 Modelo con difusor.

2.2.1 DEFINICIÓN DEL NÚMERO DE SWIRL:

En procesos de combustión aparece el mencionado número de swirl. El número de swirl es adimensional y cuantifica la turbulencia que hay en el flujo. Hay varios métodos para

variar el número de swirl: mediante álabes, usando entradas axiales y tangenciales combinadas o por la entrada de flujo directamente tangencial a la cámara de combustión. En este trabajo se han empleado los alabes.

El estudio del swirl es debido a que variándolo se puede mejorar la eficiencia del mezclado y la disminución de las emisiones contaminantes en la combustión. Se emplea para casos como quemadores industriales y motores de gasolina o diésel.

Este parámetro se define como el cociente entre el flujo axial de momento angular y el flujo axial de momento lineal (multiplicado por el radio de salida). El número de Swirl permite caracterizar la componente tangencial del chorro anular. Se define como:

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

Para valores de swirl altos ($S > 0.6$) se empieza a producir recirculación radial/axial, originando la formación de una zona central de recirculación toroidal como consecuencia de la apertura del flujo debida a su rotación.

Los resultados del número de swirl obtenidos para este TFG es $S=1.2$ en el caso de la cámara sin difusor y $S=1.4$ para el caso con difusor.

2.3 MODELO NUMÉRICO

2.3.1 CARACTERÍSTICAS DEL FLUJO Y DEL FLUIDO

En este apartado se establecerán las características del flujo y del fluido que se utilizarán en las posteriores simulaciones.

Para las sustancias que intervienen en la mezcla y en la combustión se ha empleado como combustible una mezcla de metano y un compuesto de las mismas características que el metano pero que no participa en la reacción de combustión. Esto quiere indicar que la mezcla será estequiométrica, no habrá exceso de metano en ningún caso. Con la inclusión de esta sustancia se puede regular la estequiometría del combustible para obtener mezclas ricas o pobres. El oxidante será aire de la atmósfera.

En este trabajo también se estudiará el efecto que tiene la variación del dosado en la combustión. Para ello se bajará el dosado a 0,8 y 0,6 definiendo el dosado como la cantidad de combustible que se introduce en relación con la cantidad de combustible que se puede quemar de forma estequiométrica.

En la *tabla 2.1* y *tabla 2.2* se muestran los datos del combustible y oxidante que se introducen en la cámara de combustión y las propiedades de éstos en condiciones ambiente, respectivamente.

Tabla 2. 1 Condiciones de contorno.

	Tobera central	Tobera anular
Velocidad axial (m/s)	0.66	1.54
Intensidad turbulenta	7.5%	12%
Diámetro Hidráulico (m)	0.025	0.014
Temperatura (K)	300	1200
Fracción másica modelo estequiométrico	0.234 CH ₄ +0.766 Add	0.22 O ₂ +0.78 N ₂
Fracción másica modelo 0.8	0.187 CH ₄ +0.813 Add	0.22 O ₂ +0.78 N ₂
Fracción másica modelo 0.6	0.14 CH ₄ +0.86 Add	0.22 O ₂ +0.78 N ₂
Caudal (m3)	0.000323977	0.003047973
Gasto (m3/s)	0.000211448	0.000897674

Tabla 2. 2 Características de combustible y oxidante.

	Combustible (Metano)	Oxidante (aire)	Mezcla
Densidad (kg/m³)	0.717	1.225	Gas ideal
Viscosidad (kg/m·s)	-	1.7894e-05	1.72e-05
Conductividad térmica (w/m·K)	-	0.0242	0.0454
Difusividad másica (m²/s)	-	-	2.88e-05
Peso molecular (kg/k·mol)	16.043	28.966	-

2.3.2 CARACTERÍSTICAS DE LA MALLA

Se mencionó anteriormente que se emplearía dos tipos de quemadores, uno con difusor y otro sin él. Aquí se explica brevemente las características de ambos.

El modelo sin difusor cuenta con unas 600.000 celdas hexaédricas. (*Figura 2. 3*)

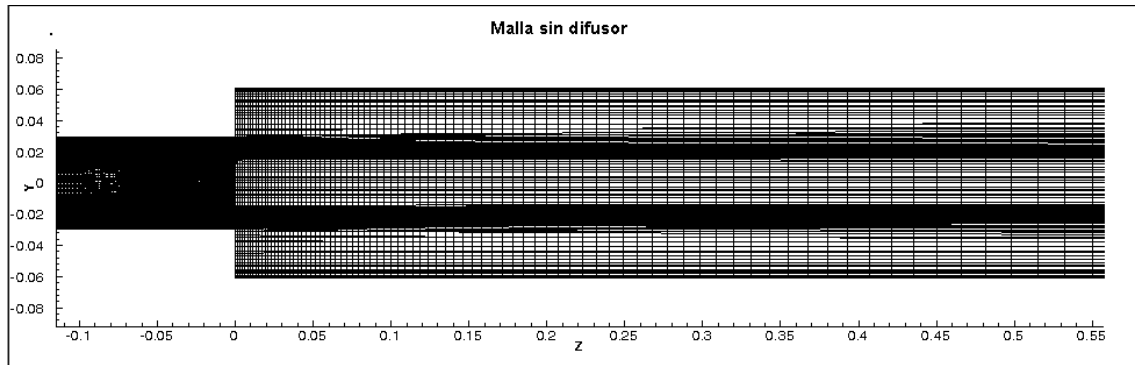


Figura 2. 3 Malla sin difusor

Los modelos con difusor cuentan con celdas tetraédricas. Para el modelo con difusor se ha decidido refinar la malla de partida debido al menor número de celdas que tiene y en consecuencia reducir el tiempo de cálculo necesario para que los resultados lleguen a converger. La malla original cuenta con unas 400.000 celdas y la malla refinada con 1.2 millones de celdas. (Figura 2. 4)

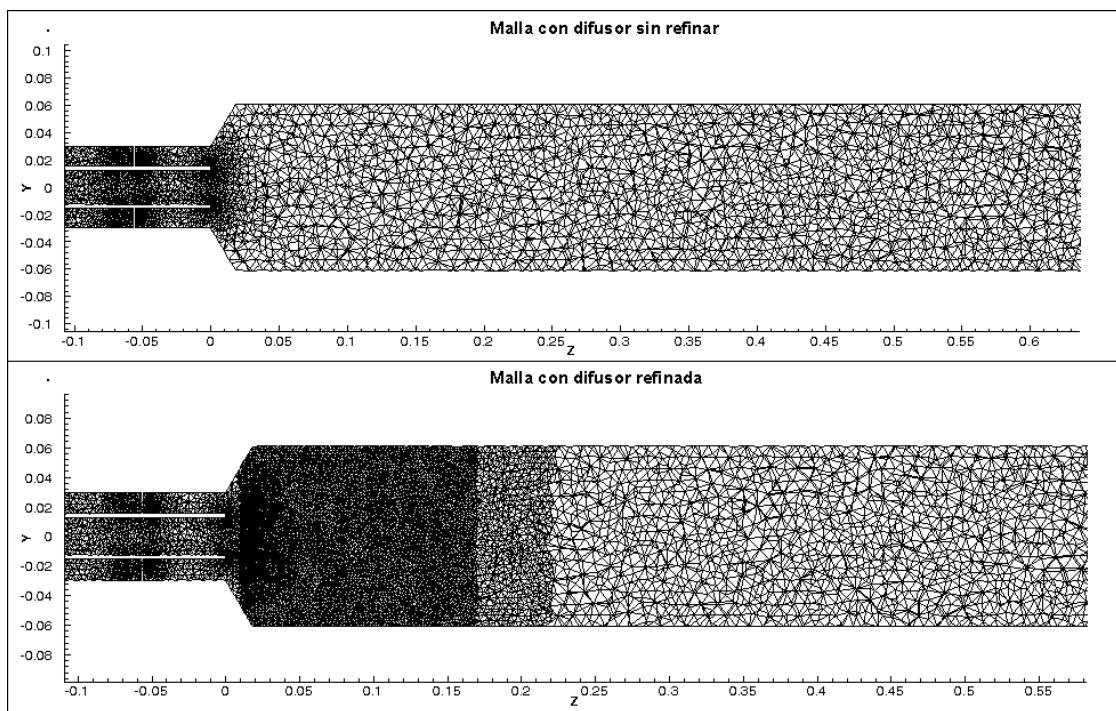


Figura 2. 4 Mallas con difusor.

Se puede ver que en el caso de la malla refinada hay franjas más oscuras. Esto quiere decir que se ha refinado dos veces en el caso de la zona más oscura y solo una para la franja que llega hasta 0.22 metros. El motivo de situar en esas zonas un mayor número de celdas es debido a que es en los primeros centímetros de la cámara de combustión donde se encuentra la llama, por ello es la zona más interesante a estudiar ya que es donde

ocurren las reacciones, el resto de la cámara no influye tanto en la obtención de los resultados.

2.3.3 MODELO COMPUTACIONAL

Este trabajo se basa en la simulación de la combustión en un quemador, para ello se emplea los conocimientos desarrollados por la Fluidodinámica Computacional o CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Es una rama de la mecánica de fluidos donde se realiza la simulación numérica del comportamiento de los fluidos, es decir, se tiene en cuenta la transferencia de calor, las reacciones químicas y otros fenómenos físicos. La CFD resuelve las ecuaciones del flujo fluido en la región o dominio de interés, con condiciones en los contornos del dominio establecidas por el usuario. (Saavedra, 2010)

Este tipo de análisis conlleva mucho trabajo computacional. Lo que reduce drásticamente el tiempo de trabajo humano, reemplazándolo por tiempo de máquina y, consecuentemente, reduciendo costes.

2.3.3.1 Etapas de resolución

Para la resolución de problemas en CFD hay que seguir una serie de etapas:

- 1) Creación de la Geometría/Malla.
- 2) Definición de la física del modelo (se selecciona el modelo matemático adecuado).
- 3) Solución del problema en CFD.
- 4) Visualización de los resultados en el Post-procesador.

Las ecuaciones que gobiernan la transferencia de masa, cantidad de movimiento, energía, etc...se resuelven en cada uno de los elementos de la malla.

La **resolución del problema en CFD** consta de 3 elementos principales:

1. El primero es discretizar el flujo continuo, para ello las variables de campo (velocidad, densidad...) se aproximan por un número finito de valores discretos en los nodos.
2. En el segundo las ecuaciones diferenciales también se discretizan. Consiste en la adaptación a un sistema finito de ecuaciones algebraicas con variables independientes discretas.

3. Por último, el sistema de ecuaciones algebraicas se resuelven iterando y así se consigue calcular los valores de las variables de los nodos.

Existen varios métodos para discretizar las ecuaciones que gobiernan el fluido, siendo las más destacadas las diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos.

El software que se utilizará para resolver los distintos modelos es Fluent 14. Fluent utiliza el método de los volúmenes finitos. Para saber cómo resuelve el software los modelos, se añade una breve explicación del método de resolución de volúmenes finitos.

2.3.3.2 Método de volúmenes finitos

Este método aplica las ecuaciones de conservación a un volumen de control. La forma de resolverlo es integrando y resolviendo el conjunto de ecuaciones de:

- a) conservación de masa
- b) cantidad de movimiento en las tres direcciones
- c) las propiedades turbulentas
- d) las especies químicas y la energía

Se realiza en cada volumen de control del dominio computacional de forma acoplada.

Para ello se parte de la ecuación genérica de mecánica de fluidos:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{Transitorio}} + \underbrace{\text{div}(\rho\bar{u}\phi)}_{\text{Convectivo}} = \underbrace{\text{div}(\Gamma_\phi \text{grad}\phi)}_{\text{Difusivo}} + \underbrace{\sum}_{\text{Fuente}} \quad 2.1$$

Donde,

ϕ : es la propiedad específica.

ρ : densidad.

Γ : es el coeficiente de difusión de la propiedad específica. La cual se integra sobre el volumen de control:

$$\int_{VC} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{VC} \text{div}(\rho\phi u) dV = \int_{VC} \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) dV + \int_{VC} S_\phi dV \quad 2.2$$

La principal ventaja de este método es que la discretización espacial se lleva a cabo directamente en el espacio físico del problema. Por lo tanto, no hay problemas con la

transformación entre sistemas de coordenadas como ocurre con el método de las diferencias finitas.

Este método presenta robustez y estabilidad para la obtención de máximos o mínimos discretos. Se adapta a cualquier tipo de malla. Es un método conservativo, es decir, las integrales de superficie y volúmenes de control que comparten fronteras. (Pope, 2000)

2.3.4 MODELO DE TURBULENCIA

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

No hay un único modelo de turbulencia, por tanto, la elección del modelo de turbulencia dependerá de consideraciones tales como el nivel de precisión necesario, los recursos computacionales disponibles y la cantidad de tiempo disponible para la simulación entre otros. Para hacer la elección más adecuada de modelo para su aplicación, es necesario entender las capacidades y limitaciones de las diferentes opciones: DNS, LES y RANS.

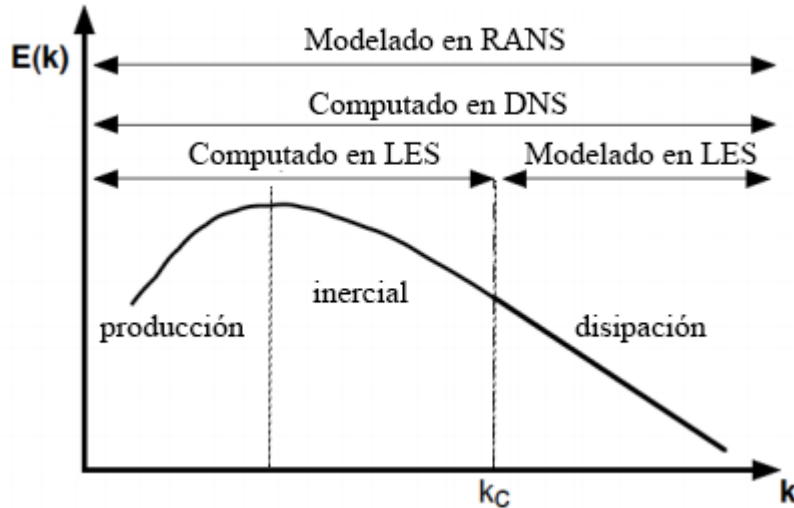


Figura 2. 5 Energía turbulenta según el tipo de modelo. (Poinsot, 2005)

2.3.4.1 DNS (Direct Numerical Simulation)

En este modelo todas las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelven sin ningún modelo para movimientos turbulentos, es decir, por integración directa. Todas las escalas de la turbulencia se determinan de manera explícita y sus efectos se muestran en la combustión. El DNS predice todas las variaciones de cualquier variable en el tiempo, como un sensor de alta resolución mediría en un experimento. Desarrollado en los últimos veinte años

gracias al desarrollo de computadoras de alto rendimiento. El modelo DNS ha cambiado el análisis de la combustión turbulenta pero todavía se limita a usos experimentales simples. (Poinsot, 2005)

2.3.4.2 LES (Large Eddy Simulation)

Simulación de grandes torbellinos. Este modelo separa las escalas turbulentas en equilibrio (rango inercial de la subcapa logarítmica), de los torbellinos contenedores de velocidad. Para ello LES utiliza filtros de convolución espacial, que bien ajustados separan el campo turbulento en dos componentes:

- Una componente que contiene la cinemática de las grandes escalas y escalas en el rango inercial (Supergrid scale).
- Otra componente que contiene escalas disipativas (Subgrid scale).

Es decir será necesario modelar la escala inercial en la que contiene la cinemática de grandes escalas. Esto influye en el refinamiento, debido a que al hacer más fina la malla, el número de escalas modeladas, es más pequeño, y LES es igual al DNS. Esto se ilustra en la *Figura 2. 6*.

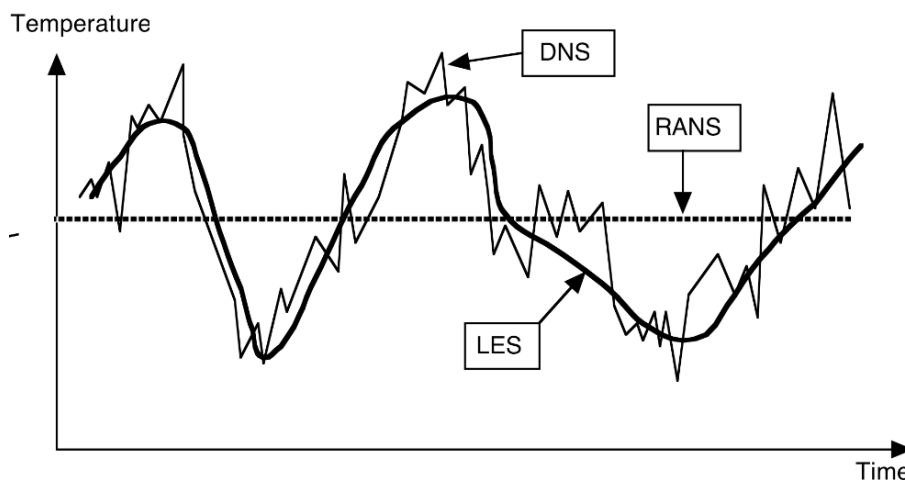


Figura 2. 6 Evolución temporal de la temperatura realizado con DNS, RANS y LES en una llama turbulenta. (Poinsot, 2005)

Este método de resolución se emplea para flujos no reactivos y no reactivos (Poinsot, 2005).

Actualmente es posible utilizar funciones de pared en LES. Sin embargo muchas de las ventajas de LES se pierden ya que el modelo de pared utilizado es similar a los utilizados en los modelos RANS. Esto provoca que al utilizar LES en todo el dominio halla que realizar DNS en las proximidades de la pared. (Ros, 2007)

2.3.4.3 RANS (Reynolds Averaged Navier Stoke)

Este modelo consiste en descomponer el campo de velocidades y promediar en el tiempo el movimiento y las fluctuaciones turbulentas (*Figura 2. 7*):

$$v_x(x, y, z, \tau) = V_x(x, y, z) + v_x'(x, y, z, \tau) \quad 2.3$$

Donde,

V_x : promedio en el tiempo de la velocidad.

v_x' : rango de velocidad fluctuante.

v_x : resultante de las otras dos velocidades, es decir, la velocidad instantánea.

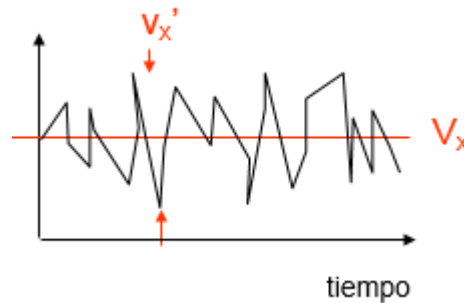


Figura 2. 7 Representación de la velocidad promedio y las fluctuaciones del método RANS.

Esto también se puede aplicar al resto de propiedades del fluido:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad 2.4$$

ϕ hace referencia a cualquier escalar V_x, V_y, V_z, T , especies químicas... El promedio en el tiempo de cualquier propiedad fluida es:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \phi d\tau \quad 2.5$$

Sustituyendo la ecuación de continuidad ([ecuación 2.6](#)) y en la ecuación general de mecánica de fluidos ([ecuación 2.8](#)) tenemos con las propiedades fluidas promediadas:

Ecuación de continuidad para caso incompresible:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} &= \frac{\partial(V_x + v_x')}{\partial x} + \frac{\partial(V_y + v_y')}{\partial y} + \frac{\partial(V_z + v_z')}{\partial z} = \\ &= \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} + \frac{\partial v_x'}{\partial x} + \frac{\partial v_y'}{\partial y} + \frac{\partial v_z'}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad 2.6$$

Resultando el promedio del campo de velocidades:

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} = 0 \quad 2.7$$

Ecuación general de mecánica de fluidos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S \quad 2.8$$

La combinación para la dirección x es:

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial \tau} + \vec{v} \cdot \nabla v_x \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \Gamma(V_x) + S_{Mx} \quad 2.9$$

Llegando a la ecuación:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial V_x}{\partial \tau} + V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_x}{\partial y} + V_z \frac{\partial V_x}{\partial z} \right) = \\ = - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 V_x}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 V_x}{\partial z^2} - \rho \frac{\partial v_x' v_x'}{\partial x} - \rho \frac{\partial v_x' v_y'}{\partial y} - \rho \frac{\partial v_x' v_z'}{\partial z} + S_x \end{aligned} \quad 2.10$$

En la [ecuación 2.10](#) se muestran las velocidades promedio y el tensor de tensiones de Reynolds para la dirección x. (Novoselac, 2010)

Teniendo en cuenta que se tiene también la dirección z e y hay que añadir otras seis incógnitas que vienen del tensor de esfuerzos de Reynolds, además manteniendo el mismo número de ecuaciones.

En total se tiene 6 ecuaciones del tensor de tensiones más otras dos ecuaciones del modelo utilizado.

Es decir, se aproxima la turbulencia mediante métodos estadísticos. Así se puede resolver el comportamiento general del flujo sin necesidad de calcular las escalas más pequeñas. Las ecuaciones de Navier- Stokes se promedian en el tiempo y dan lugar a las ecuaciones RANS.

2.3.4.4 Elección modelo de turbulencia

En vista del análisis de esos tres modelos de turbulencia, la elección apropiada para este trabajo es RANS ya que para el DNS no se tiene suficiente capacidad computacional y LES se aproxima bastante al DNS.

2.3.5 MODELO K- ϵ RNG

Una vez seleccionado el modelo de turbulencia RANS, tenemos una serie de modelos de viscosidad para la resolución del problema. En la *Figura 2. 8* el modelo de turbulencia RANS ofrece distintas posibilidades. Cada modelo de turbulencia tiene sus ventajas e inconvenientes y está diseñado para unas características concretas.

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.

Figura 2. 8 Modelos de turbulencia. (Fluent, 2009)

El modelo que más se ajusta a este trabajo es el modelo k- ϵ RNG. A continuación se explica la elección de este modelo.

El modelo k- ϵ RNG se obtuvo utilizando una técnica estadística rigurosa. Es similar en su forma a la norma modelo k- ϵ , pero incluye las siguientes opciones:

- El modelo RNG tiene un término adicional en su ecuación de disipación ϵ que mejora significativamente la exactitud de los flujos.
- El efecto del torbellino en la turbulencia se incluye en el modelo RNG, mejorando la precisión de los flujos de rotantes.
- La teoría RNG proporciona una fórmula analítica para los números de Prandtl, mientras que el modelo k- ϵ utiliza valores constantes especificados por el usuario.
- El modelo k- ϵ es un modelo para alto número de Reynolds, la teoría RNG proporciona una fórmula diferencial derivada analíticamente para la viscosidad

efectiva que da cuenta de los efectos para bajos números de Reynolds. El inconveniente es que depende de un tratamiento adecuado de la zona próxima a la pared. (Fluent, 2009)

Como no preocupa el efecto cerca de la pared, no afecta.

2.3.6 MODELOS PARA COMBUSTIÓN

Este trabajo ha sido diseñado para flujo no premezclado, es decir, el combustible y oxidante entran por cilindros distintos, eso quiere decir que la mezcla se realiza una vez que se encuentran en la cámara de combustión. Este tipo de quemador evita el peligro de un retroceso de la llama en la cámara de mezcla, como en el caso de flujos premezclados.

La base del enfoque del modelo de no premezcla es que bajo un determinado conjunto de hipótesis de simplificación, el estado termoquímico instantáneo del fluido está relacionado con la fracción de mezcla, f . La fracción de mezcla se puede escribir en términos de la fracción de masa atómica como:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad 2.11$$

donde Z_i es la fracción de masa elemental para el elemento, i . El subíndice ox denota el valor en la entrada de corriente de oxidante y $fuel$ la denominación del combustible. Si los coeficientes de difusión para todas las especies son iguales, entonces la [ecuación 2.11](#) es idéntica para todos los elementos, y por tanto la fracción de mezcla es única.

Las velocidades de reacción para flujos turbulentos pueden ser representadas por tres modelos: PDF, el ED y el EDC. A continuación se describen sus características.

2.3.6.1 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 que describe la probabilidad relativa de esta variable aleatoria para tomar en un valor dado. La función de densidad de probabilidad, escrita como $p(f)$,

puede ser referida como la fracción de tiempo que el fluido se encuentra en la proximidad del estado f . Esto se representa en la *Figura 2. 9*.

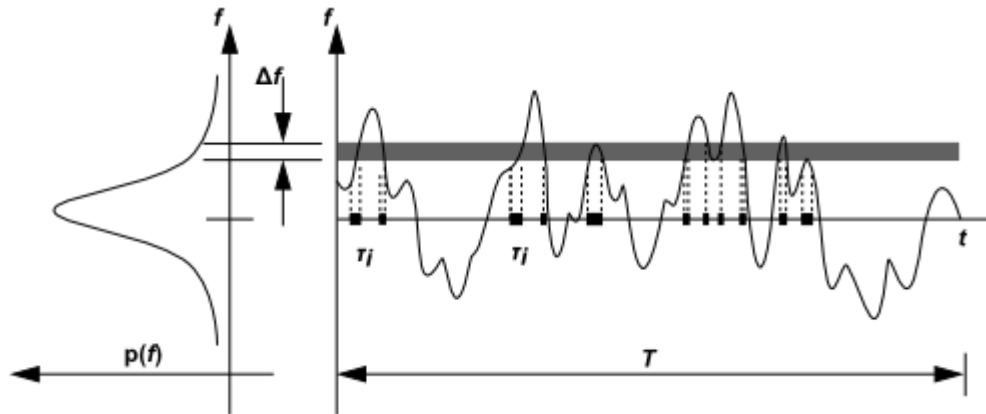


Figura 2. 9 Descripción gráfica de la función de densidad de probabilidad. (Fluent, 2009)

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]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{f}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{f} \right) \quad 2.12$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{f^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \overline{f^2}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{f^2} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{f} \right)^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f^2} \quad 2.13$$

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 el tiempo se pueden relacionar con la mezcla fraccionada 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, 2009)

2.3.6.2 ED (Eddy-Disipación)

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 obtener modelos realistas deben utilizarse mecanismos de liberación de calor en uno o dos pasos, ED y EDC respectivamente. Este modelo no puede predecir las especies de control cinético como los radicales. Para poder incorporar los mecanismos de cinética química de varios pasos en los flujos turbulentos hay que utilizar el modelo EDC. Esto es debido a que en ED cada reacción tiene la misma velocidad y por lo tanto el modelo solo hay un paso para la reacción.

Se utiliza como referencia la obra de Magnussen y Hjertager 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:

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{\mathcal{R}}}{v'_{\mathcal{R},r} M_{w,\mathcal{R}}} \right) \quad 2.14$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j v''_{j,r} M_{w,j}} \quad 2.15$$

Donde,

Y_P : La fracción de masa de cualquier especie de productos P

$Y_{\mathcal{R}}$: La fracción de masa de un reactivo particular \mathcal{R}

A y B son constantes empíricas

En la [ecuación 2.14](#) y [ecuación 2.15](#), la velocidad de reacción química se rige por la escala de tiempo de mezclado del torbellino, k/ε , como en el modelo eddy-breakup model de Spalding. La combustión se produce cuando la turbulencia está presente ($k/\varepsilon > 0$), no siendo necesario de una fuente para la ignición de la mezcla, aquí es donde no se necesitan las ecuaciones de Arrhenius, que permite ahorrar coste computacional. (Fluent, 2009)

2.3.6.3 EDC (Eddy-Dissipation-Concept)

Este modelo es una extensión del modelo de ED, que incluye mecanismos químicos detallados en los flujos turbulentos. Se supone que la reacción se produce en pequeñas escalas turbulentas. Aquí las reacciones de químicas (incluyendo la combustión) ocurren en varios pasos, a diferencia de ED. Estos mecanismos químicos se basan en las tasas de Arrhenius, que son distintos para cada reacción.

El modelo EDC trata de incorporar las escalas turbulentas más pequeñas en flujos turbulentos donde la combustión tiene un papel importante. El modelo EDC se ha demostrado eficaz sin la tener que cambiar las constantes para una gran variedad de problemas de combustión con flujo premezclado, en donde tanto la cinética química es más rápida que la mezcla en general.

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 CONCLUSIONES

- Para las simulaciones realizadas en este trabajo se empleará K- ϵ RNG como modelo de turbulencia.
- Para la combustión se utilizará el modelo PDF.
- La malla base será de 400.000 celdas tetraédricas.

3 Capítulo

VALIDACIÓN DE LOS MODELOS
COMPUTACIONALES

3.1 VALIDACIÓN DEL MODELO DE TURBULENCIA

Como se explicó en el capítulo 2 el modelo de turbulencia empleado es K-ε RNG por los beneficios que ofrecía. Ahora se tratará de validar los datos obtenidos en la simulación con los datos experimentales ofrecidos por Roback y Johnson (Roback, 1983), para ello se relacionará la velocidad axial de manera transversal a lo largo del quemador.

A efectos de validez los casos a comparar son el modelo computacional sin difusor con el modelo experimental, sin embargo se incluye en la comparación el modelo con difusor para comparar la relación entre los modelos computacionales.

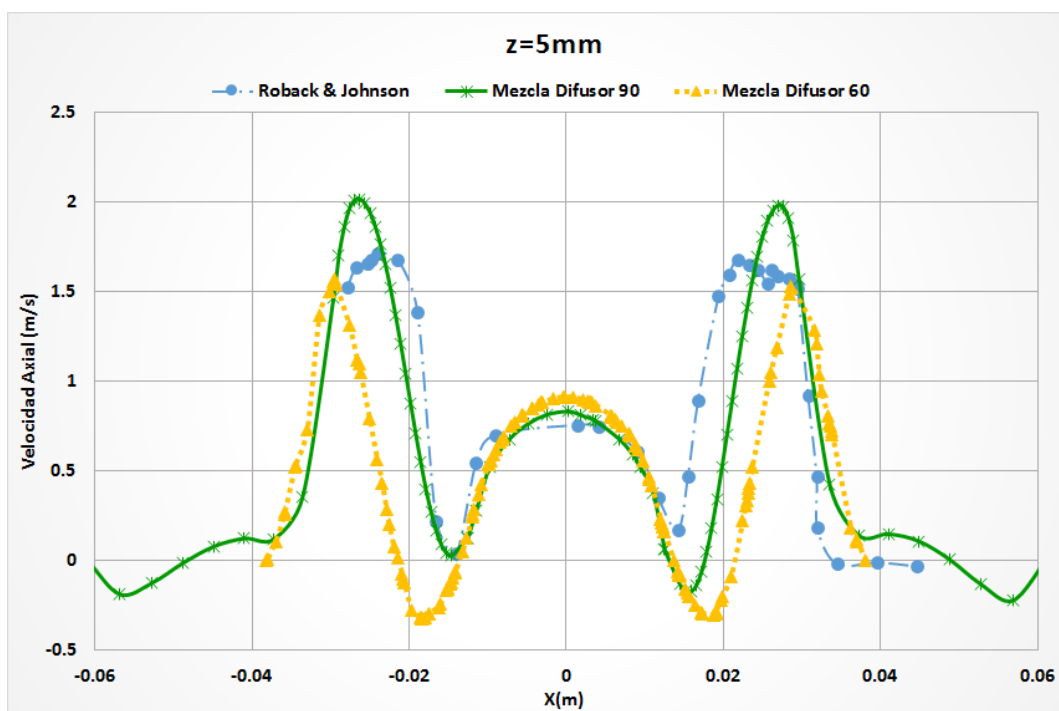


Figura 3. 1 Perfiles radial de velocidad axial en la sección Z = 5 mm.

En esta figura se muestra la sección z= 5 mm, la proximidad entre el modelo experimental y el modelo computacional sin difusor es bastante. Para este último modelo se puede apreciar la aparición de zona de recirculación en x= 0.015 m, esto indica que no es axilsimétrico. En el capítulo 4 se explicará con más detalle la aparición de esta inestabilidad, el PVC.

El caso con difusor no está muy alejado del caso sin difusor, las diferencias están en las zonas de recirculación, son simétricas respecto del eje, tienen menor velocidad y la velocidad del flujo axial también disminuye.

La proximidad de resultados es debido a que en estos primeros milímetros la mezcla de combustible y oxidante no es muy grande.

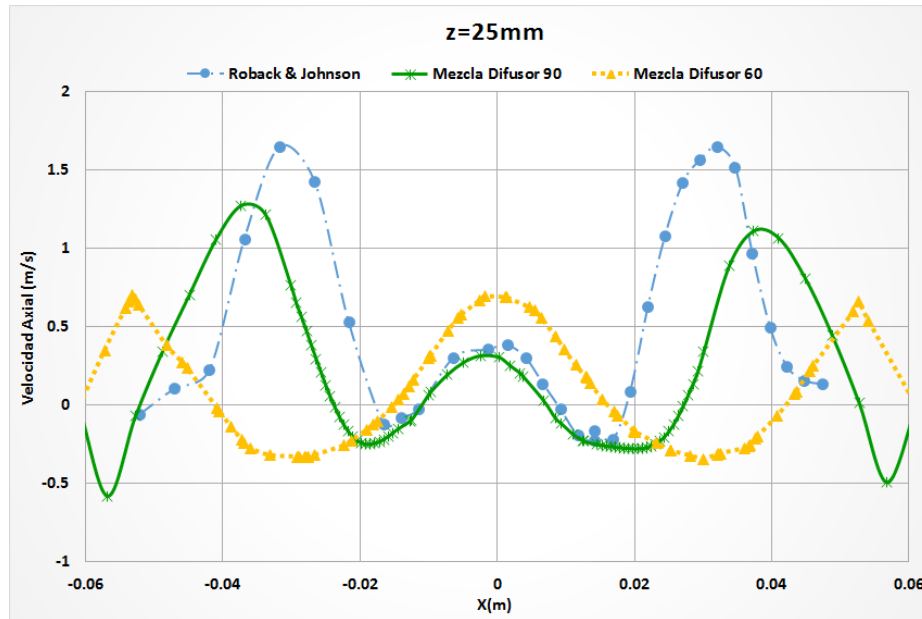


Figura 3. 2 Perfiles radial de velocidad axial en la sección Z = 25 mm.

En la Figura 3. 2 aumenta la diferencia entre los casos computacionales y el experimental.

En el caso del modelo sin difusor la velocidad del flujo central varía poco respecto al modelo de Roback y Johnson (Roback, 1983). En las zonas de recirculación de la misma tobera es donde se aprecian las diferencias ya que el flujo axilsimétrico cambia el contorno de las zonas de recirculación. Al comparar las diferencias de los flujos axiales de los modelos sin difusor existe un efecto difusivo provocado por el flujo.

La velocidad máxima del flujo axial disminuye notablemente en el caso de los modelos simulados, desplazándose este pico hacia las paredes del quemador.

Para el caso del modelo con difusor la velocidad del flujo de la tobera central sigue siendo mayor que el caso sin difusor es debido al efecto del difusor en el flujo, consiguiendo dirigir el flujo hacia delante. Las zonas de recirculación que son muy amplias aunque la velocidad es parecida.

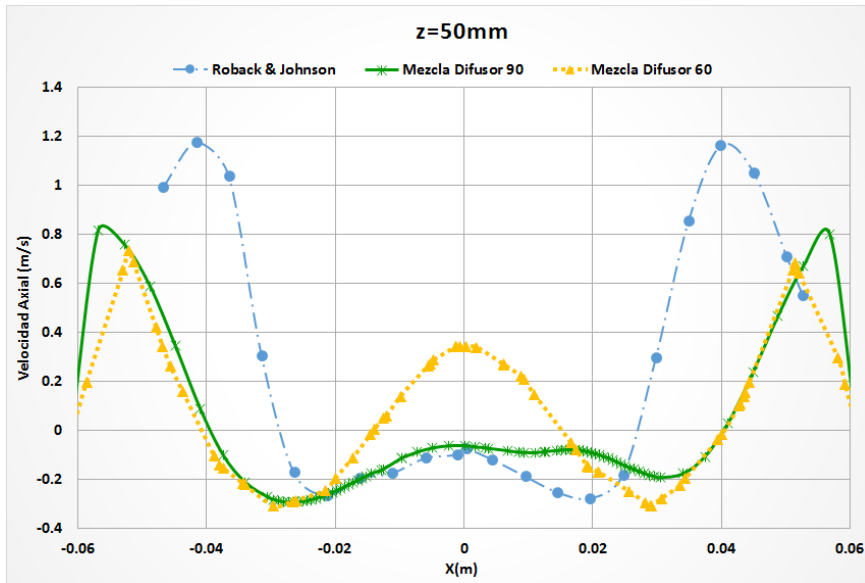


Figura 3. 3 Perfiles radial de velocidad axial en la sección $Z = 50 \text{ mm}$.

En la Figura 3. 3 es parecida a la anterior, la velocidad de la tobera central del caso sin difusor y el experimental son bastante parecidas, pero las diferencias siguen aumentando en el flujo que sale de la tobera radial por el mismo motivo de antes.

Las velocidades axiales de ambos modelos computacionales ahora prácticamente se superponen.

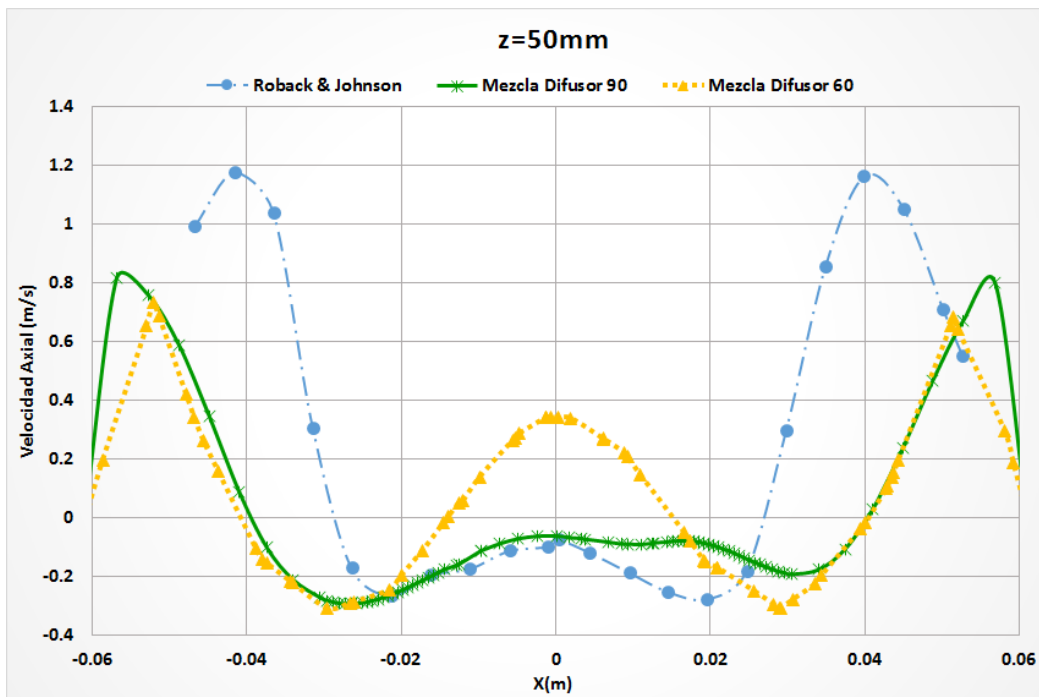


Figura 3. 4 Perfiles radial de velocidad axial en la sección $Z = 100 \text{ mm}$.

Al aumentar la distancia de la salida de los compuestos a 100 mm se consigue que los modelos computacionales se superpongan y la diferencia en el caso del modelo sin difusor computacional y el experimental varía mucho.

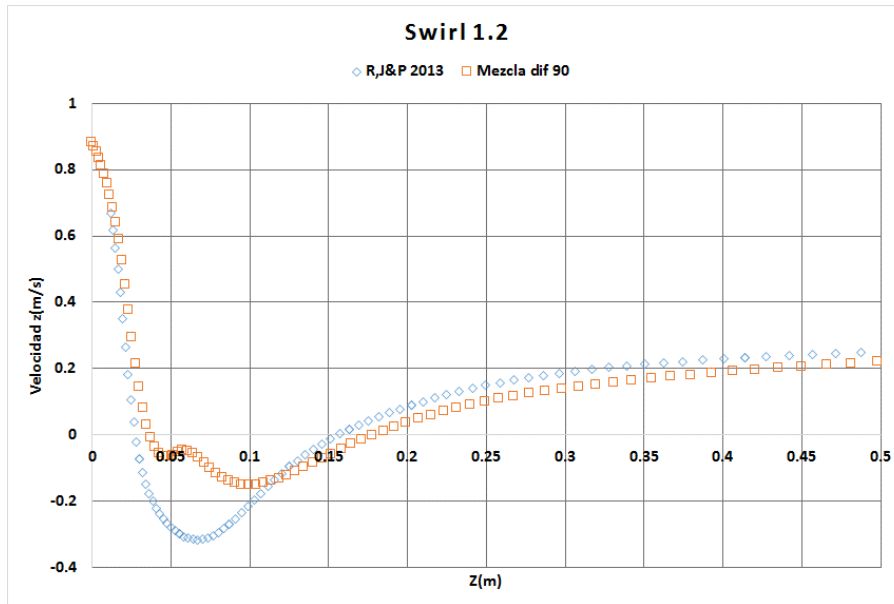


Figura 3. 5 Validación velocidad eje z sin difusor.

Los datos de Roback y Johnson (Roback, 1983) para la velocidad a lo largo del eje z solo llegan hasta medio metro, por tanto se comparará esta parte. En la Figura 3. 5 se trata de ver las diferencias que hay entre el modelo experimental y el modelo computado sin difusor. El tramo con mayor variación de datos corresponde entre 50 y 100 mm, es decir, en la zona de mezcla de combustible y oxidante.

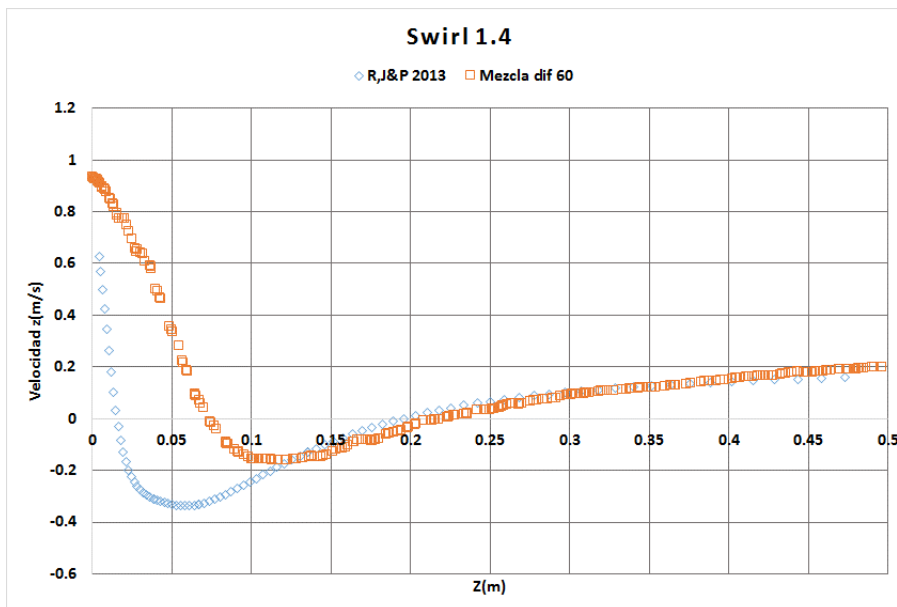


Figura 3. 6 Validación velocidad eje z con difusor.

La Figura 3. 6 no es para validar resultados ya que el modelo experimental no tiene difusor, se añade para comparar el efecto que tiene el difusor en la mezcla de los compuestos. Los datos más dispares son los más próximos a la salida de las toberas debido precisamente al difusor, pero las velocidades a partir de los 15 cm coinciden.

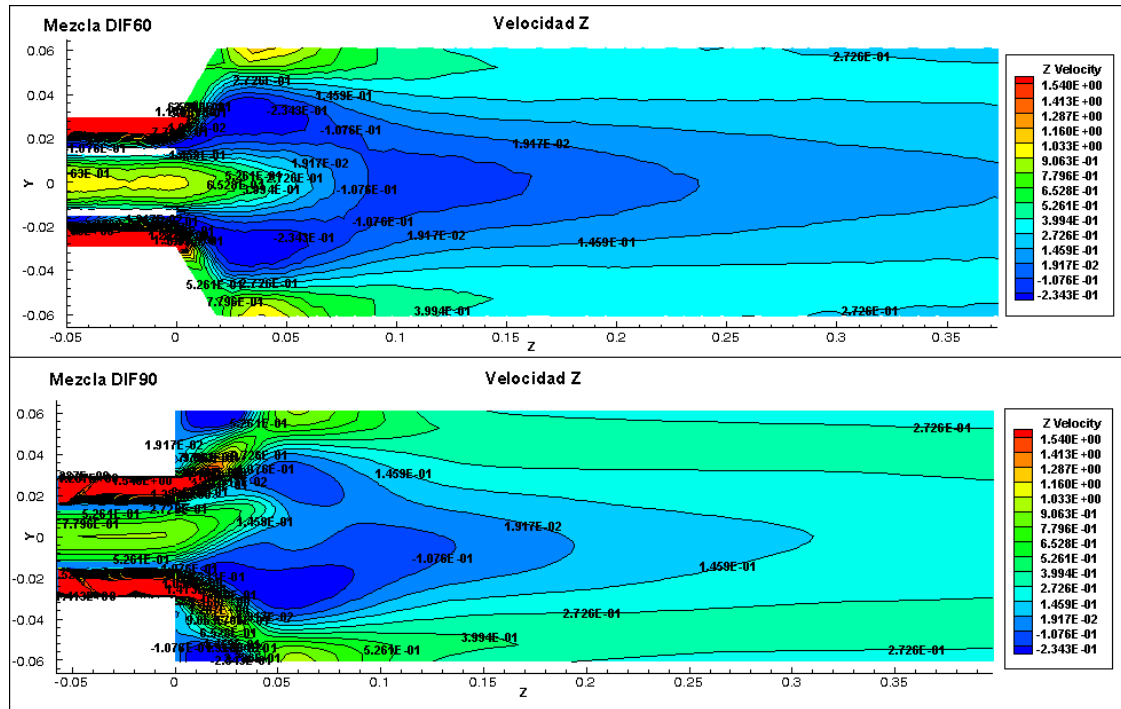


Figura 3. 7 Perfil de velocidad eje z para mezcla.

Los primeros 25 mm del quemador sin difusor son bastante aproximados al experimental, sin embargo las diferencias comienzan a los 50 mm, es decir, cuando los chorros radiales chocan con las paredes del quemador. La forma en la que el flujo incide sobre la pared es a consecuencia del ZRI.

En resumen, para los primeros centímetros de salida de las toberas el efecto difusor de fluent afecta sobre todo a los chorros radiales para ambos modelos a medida que se consideran posiciones más alejadas de las salidas de las toberas.

En el modelo sin difusor el chorro central es muy próximo al experimental pero con el inconveniente de la aparición del PVC que hace que el flujo no sea axilsimétrico.

El modelo con difusor tiene mayor velocidad del flujo central hasta los 100 mm, en los que ambos modelos se superponen.

3.2 COMBUSTIÓN DEL MODELO PDF

Este modelo de transporte calcula el efecto turbulento de las llamas, utilizando para ello una estadística tipo β . Fluent ofrece en uno de sus tutoriales una tabla definida para el metano. Para comprobar si la tabla es válida se creará una específicamente para el modelo estequiométrico, a presión atmosférica, y con las condiciones de entrada ya establecidas en el capítulo 2, es decir, 300K de temperatura de entrada del combustible y 1200K para el oxidante.

Para ambos casos se emplea la misma malla de 400.000 celdas tetraédricas, solo varía la tabla PDF.

El primer problema con utilizar la tabla de Fluent es ajustar la fracción de metano que tiene que quemarse. Esto es debido a que la fracción másica de metano viene establecido con un valor que no es la unidad, lo que obliga a tantear para encontrar el punto estequiométrico.

A partir de ahora nos referiremos al PDF de Fluent como PDF predefinido y al PDF estequiométrico para este caso PDF creado.

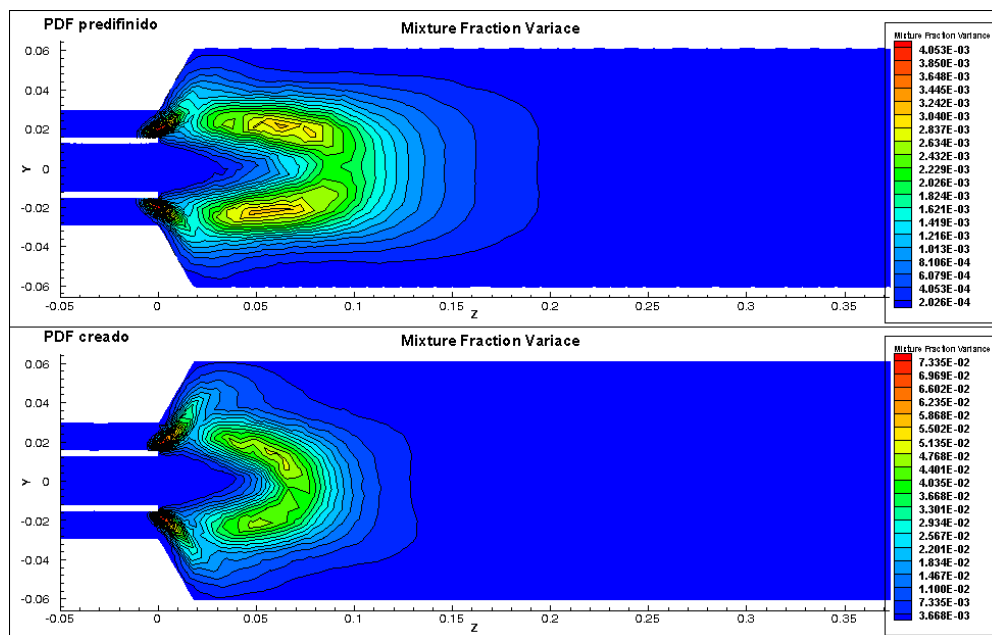


Figura 3. 8 Representación MFV para ambos modelos.

A pesar de ser para ambos casos mezcla estequiométrica, el frente de llama (Mixture Fraction Variance) indica la varianza de la fracción de mezcla que se produce) está más concentrado en el caso del PDF creado para este caso. Esto significa que se consigue hacer una mejor mezcla y en consecuencia una mejor combustión. (Figura 3. 8)

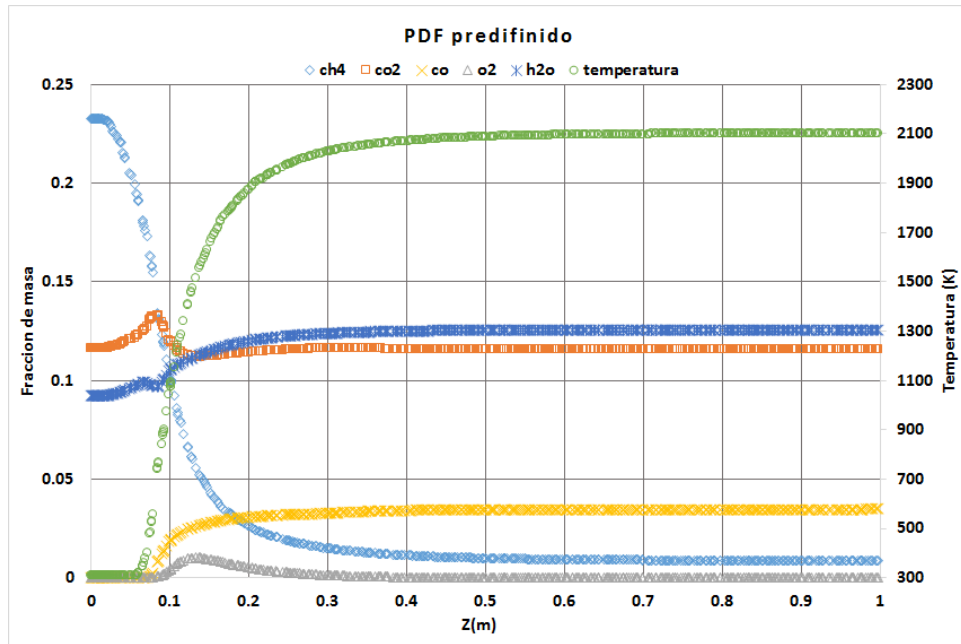


Figura 3. 9 Estructura química de la llama usando PDF predefinido.

En vista de los datos obtenidos del PDF predefinido de fluent (Figura 3. 9) no es realista, ya que establece que antes de la mezcla hay CO₂ y H₂O, debido a ello la temperatura aumenta 200 grados respecto el PDF creado. No es posible que antes de producirse la combustión estén presentes en la mezcla productos de la combustión, ya que no son las condiciones de contorno que se establecieron. El CO₂ una vez producido el frente de llama vuelve a la fracción másica de origen algo que no es lógico ya que si se parte de metano y aire, al quemarlo, aumentaría ya que es un producto de la reacción y no volver al valor original.

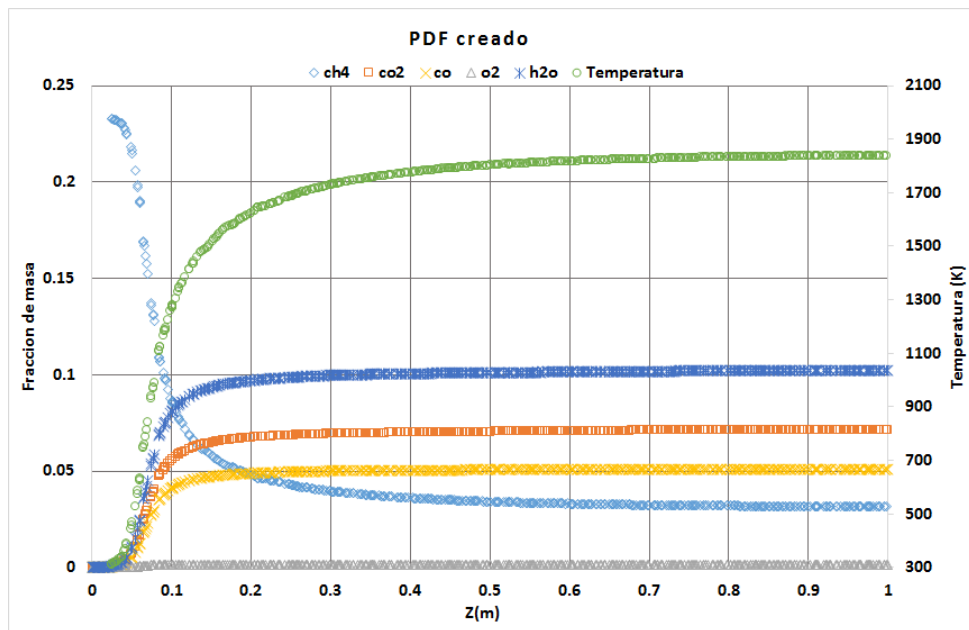


Figura 3. 10 Estructura química de la llama usando PDF creado.

En el PDF creado (*Figura 3. 10*), los productos de la combustión aumentan una vez que se produce la combustión.

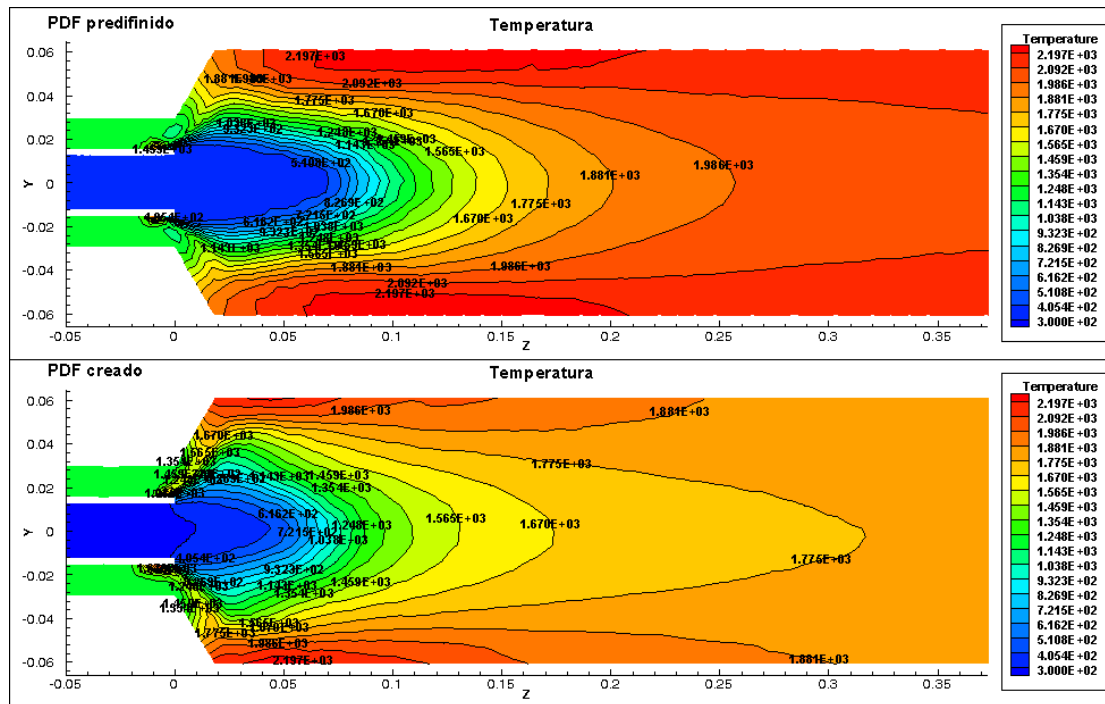


Figura 3. 11 Representación contornos de temperatura.

En la comparación de los contornos de temperaturas (*Figura 3. 11*) el PDF predeterminado aumenta la temperatura general gracias a la presencia de H₂O y CO₂ en la mezcla, como se comentó anteriormente.

Los gases de combustión son empujados por el flujo a las paredes y es donde se localizan las mayores temperaturas en ambos casos. La diferencia es que al tener el PDF predeterminado el volumen ocupado por las máximas temperaturas de los gases es notablemente mayor, además de 200 grados más elevado. Esto provocaría tener que refrigerar el quemador ya que el metal no soportaría esas temperaturas.

En vista a lo descrito, la elección de la tabla PDF más apropiada será el del PDF creado. Esto es debido a que, como se expuso antes, no es posible que los productos de la combustión aparezcan antes de la combustión.

En adelante se utilizará para el modelo de combustión PDF, tablas específicas para el caso que se estudie, es decir, se adaptarán los parámetros de temperatura o el dosado de la mezcla que requiera el caso concreto.

Para comprobar si los resultados obtenidos en la combustión son válidos tenemos que comprobar los resultados con la temperatura adiabática de llama (*Figura 3. 12*), donde se

muestra la correlación entre la temperatura y la fracción de masa de metano para llamas estequiométricas. La línea azul representa el equilibrio adiabático calculado con el código CERFACS. La mayoría de los puntos tienen temperaturas por debajo de la adiabática.

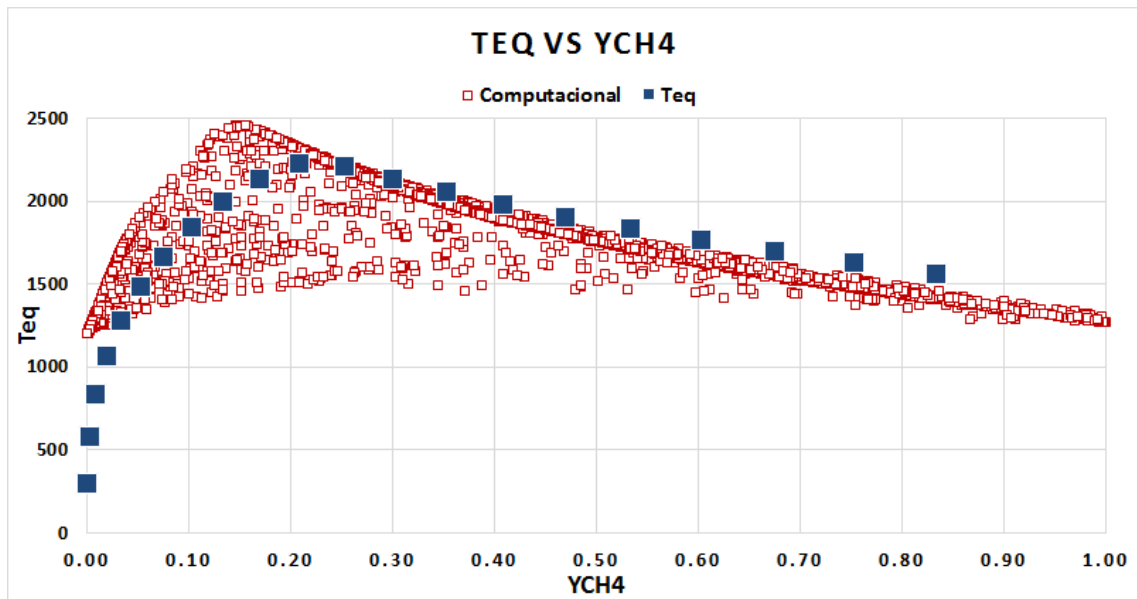


Figura 3. 12 Representación de la temperatura adiabática de llama.

3.3 REFINAMIENTO DE LA MALLA

En este apartado se estudiará el efecto del refinamiento de la malla de 400.000 celdas a 1.2 millones, para el quemador con difusor, utilizando el PDF creado, para este caso estequiométrico. Al aumentar las celdas aumenta el tiempo de cálculo, es decir, que habrá que decidir si la diferencia de los resultados es lo suficientemente grande como para sacrificar el tiempo necesario para iterar.

Para este caso se ha refinado la malla de 400.000 celdas hasta 1.2 millones concentrado en los 20 primeros centímetros del quemador, es decir, donde se concentra la llama ya que es la parte más interesante a estudiar.

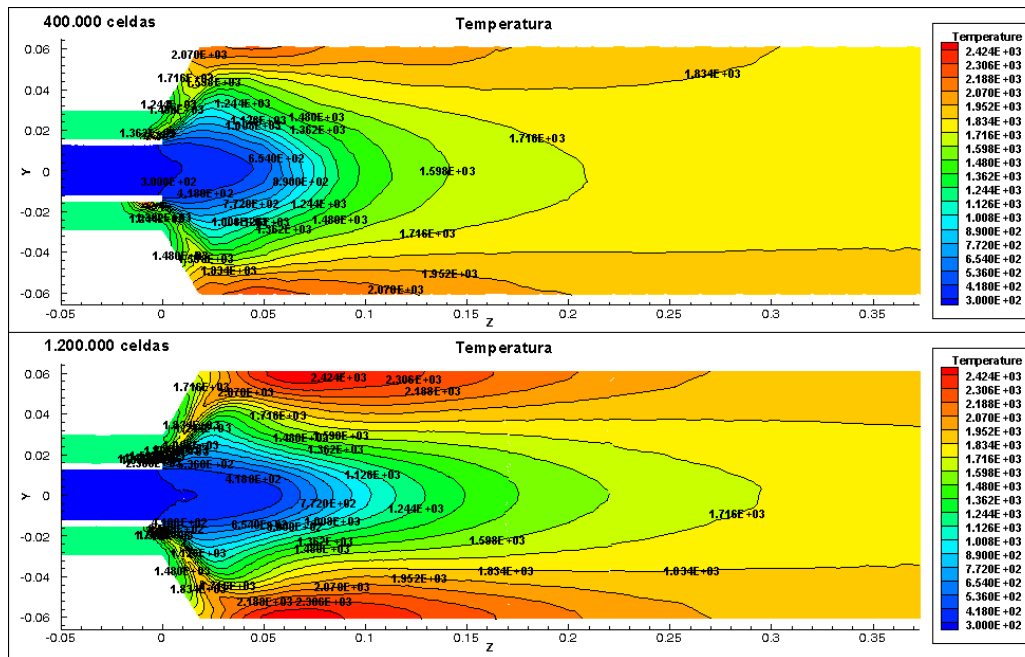


Figura 3. 13 Representación temperatura para modelo de 400K y 1.2M celdas.

En la Figura 3. 13 en la que se representa el contorno de temperaturas se puede ver que al refinar los gradientes aumentan y se suavizan respecto de la malla original. La temperatura aumenta en las paredes del quemador debido a que los gases quemados se expulsan hacia esta zona, al aumentar los nodos, aumentan la zona de iteración y por ello la variación de temperatura también lo hace.

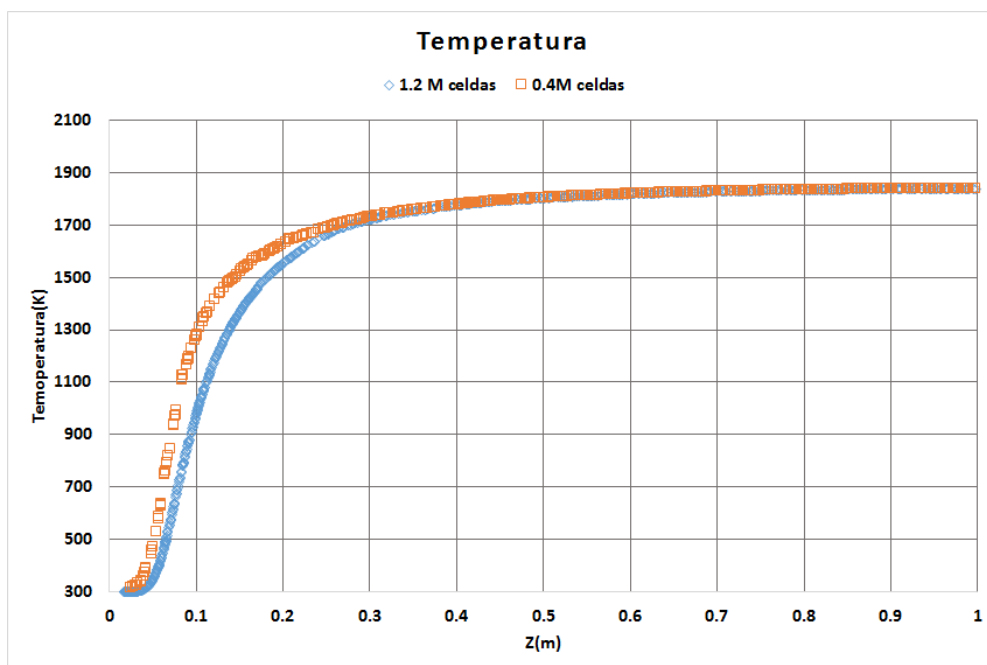


Figura 3. 14 Perfil de velocidades en el eje central del quemador.

En la siguiente *Figura 3. 14*, se muestra que la temperatura de salida de los gases sigue siendo la misma. En el modelo de 1.2M de celdas los resultados se han vuelto más difusivos.

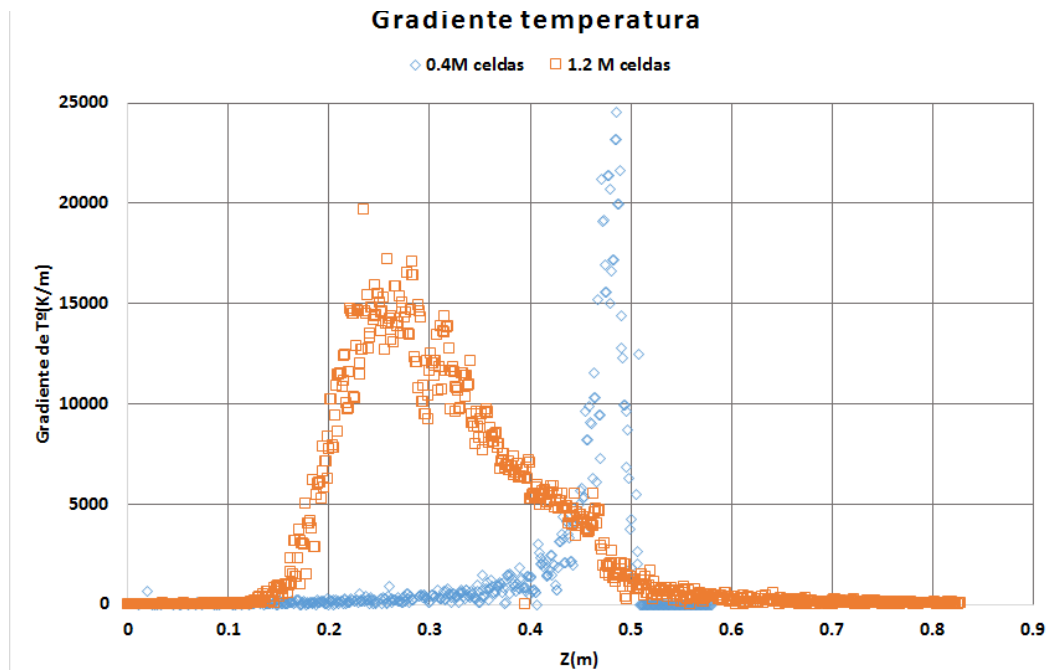


Figura 3. 15 Gradiente de temperaturas.

En la figura de gradientes de temperatura (*Figura 3. 15*) se aprecia mejor el efecto difusivo que ha tenido el aumentar la resolución. En el caso de la malla de 400.000 celdas el pico de temperaturas se concentraba en una zona muy localizada y una variación muy alta. En el caso de la malla refinada las temperaturas se han dispersado mucho y el pico ha disminuido. El objetivo que se perseguía al refinar es que el perfil de temperaturas y de los productos de combustión fuese más vertical que el original, pero se ha suavizado.

El efecto difusivo está ligado al modelo de turbulencia que se ha empleado. Como se explicó en teoría, RANS promedia las soluciones, por tanto los perfiles se suavizan. Debido a la dimensión de este trabajo no se puede utilizar el modelo DNS o LES porque como se indicó el coste computacional aumentaría considerablemente y de manera directa el tiempo de cálculo.

El resultado lógico de aumentar la resolución de la malla sería poder ver o al menos intuir las pequeñas escalas turbulentas originadas por la combustión, sin embargo debido a que se utiliza el modelo RANS no se puede apreciar las microescalas como en el caso del LES.



Figura 3. 16 Contorno velocidad axial en salida brusca RANS. (Fransen, 2011)

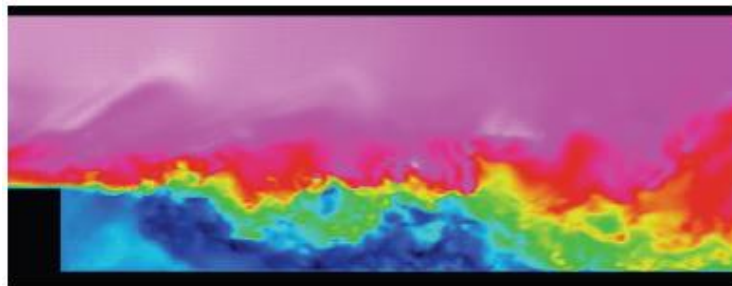


Figura 3. 17 Contorno velocidad axial en salida brusca LES. (Fransen, 2011)

En la primera imagen (Figura 3. 16) se representa un contorno de velocidad axial que sale de manera brusca de un quemador con modelo RANS. La primera impresión es la homogeneidad que presenta. El método LES muestra una resolución bastante aproximada a la integración directa, es debido a ello que la imagen muestra un contorno parecido al de una llama real. (Figura 3. 17)

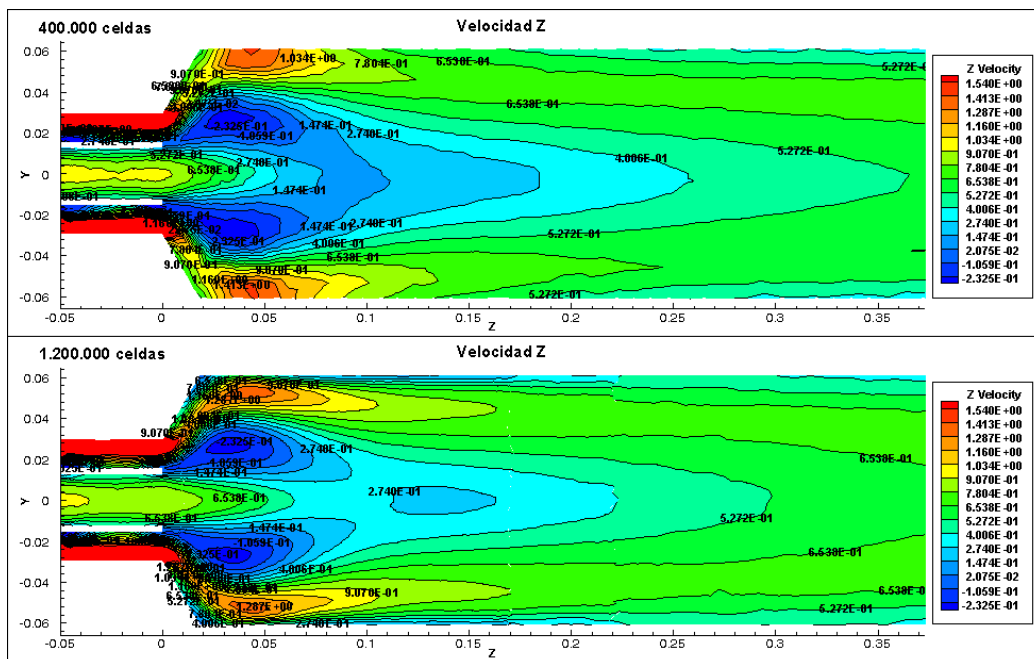


Figura 3. 18 Representación velocidad en z para modelo de 400K y 1.2M celdas.

Al refinar se puede observar que se crea una capa muy fina en la superficie del quemador.

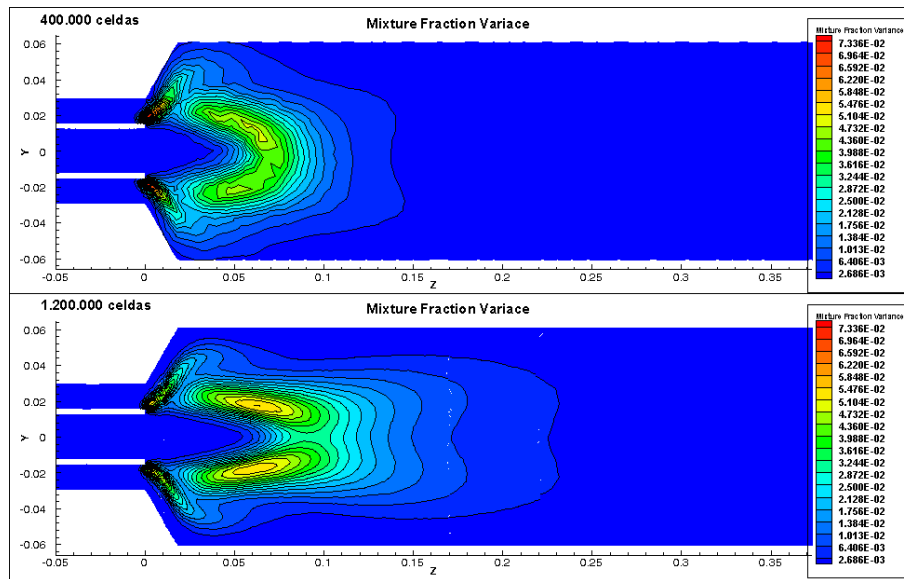


Figura 3. 19 Representación MFV para modelo de 400K y 1.2M celdas.

Se observa que en el modelo refinado, el frente de llama se divide en dos, provocado por la salida del oxidante alrededor del flujo de combustible, esto es simplemente debido a que ha aumentado la resolución de la malla. La varianza aumenta en el modelo de 1.2M de celdas pero se ve que la zona global también lo ha hecho, eso explica porque a pesar de refinar el gradiente de temperaturas y de todos los productos implicados en la combustión se han suavizado (Figura 3. 14, Figura 3. 15 y Figura 3. 20), es debido a que la varianza ha aumentado su volumen.

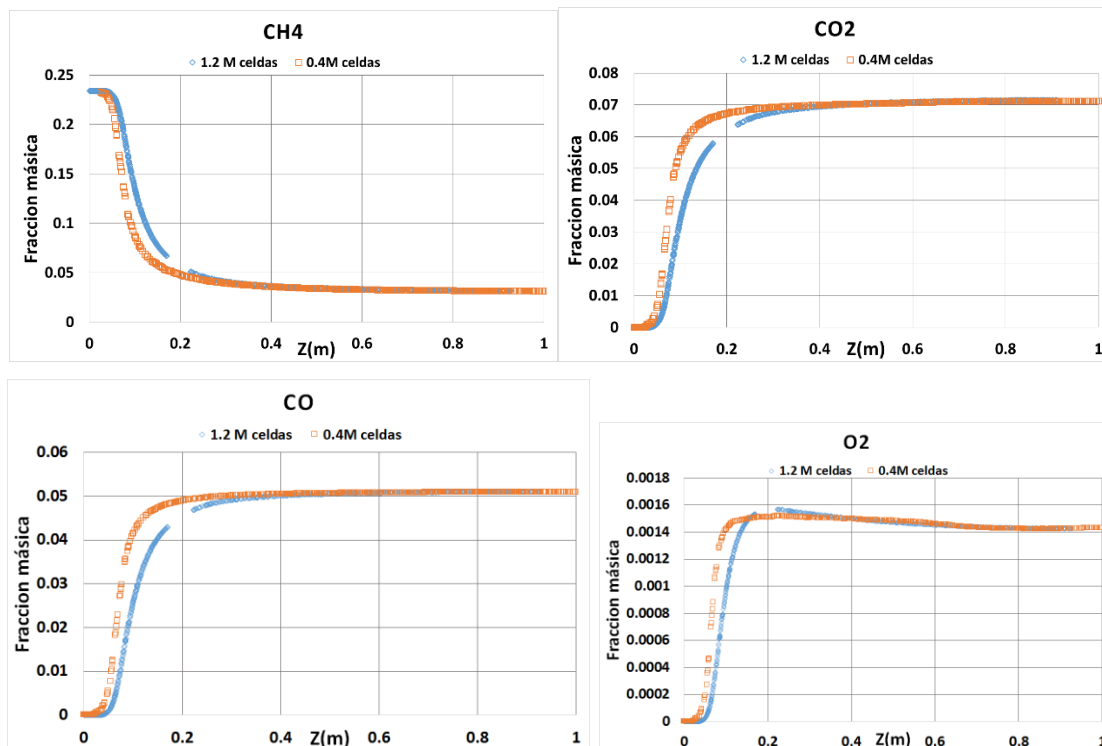


Figura 3. 20 Fracciones másicas de las sustancias de la combustión.

- Con los resultados obtenidos el PDF que se adapta a los requerimientos establecidos es el que se crea para cada modelo específico.
- La malla que se utilizará es la de 400.000 celdas, esto es debido a que las diferencias que hay con la malla refinada no aportan una gran diferencia en comparación con el incremento de tiempo de cálculo necesario.

4 Capítulo

INFLUENCIA DEL DIFUSOR Y OTROS
MODELOS DE COMBUSTIÓN

4.1 EFECTO DEL DIFUSOR EN LA MEZCLA Y EN LA COMBUSTIÓN

En este apartado se trata de estudiar cómo afecta el uso del difusor en mezcla y en combustión. El difusor es un tronco de cono que une la tobera anular con la cámara de ensayo y tiene un semiángulo de 60°.

Para todos los casos con difusor se ha empleado una malla de 400.000 celdas y para el caso sin difusor 600.000 celdas.

4.1.1 CASO DE MEZCLA

El primer caso a analizar es para los modelos sin activación de combustión, ya que es el caso del que se parte para la combustión.

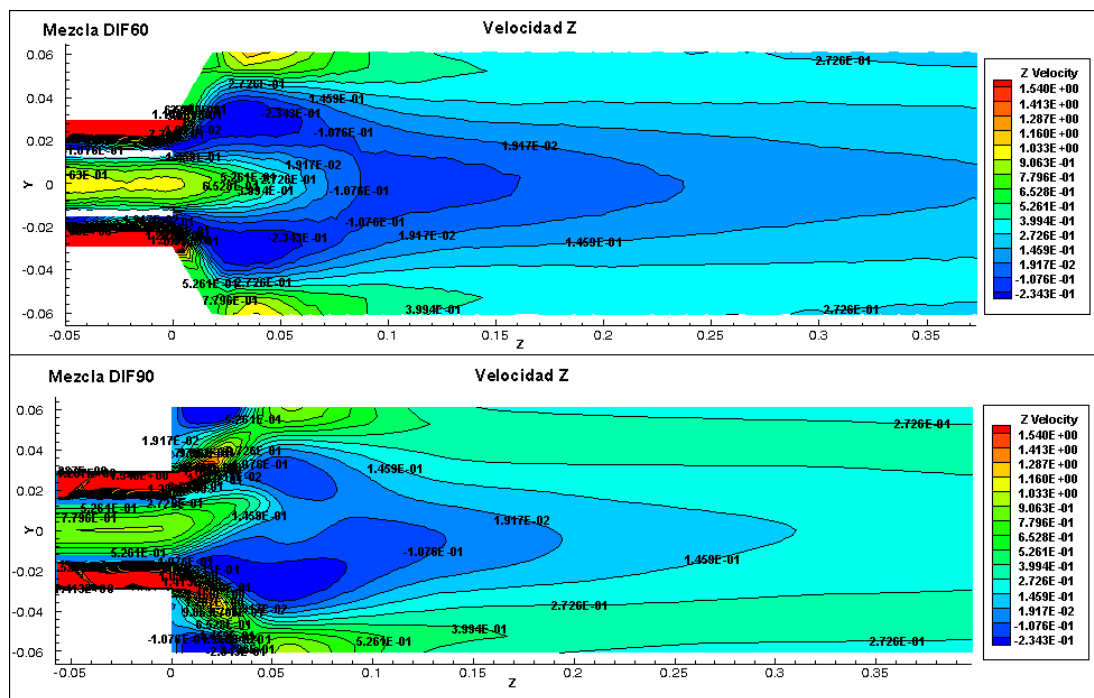


Figura 4. 1 Perfil de velocidad eje z para mezcla.

En la Figura 4. 1 se puede apreciar el efecto que tiene el difusor en el flujo. En la mezcla con difusor aparece una ZRI, mientras que en el caso sin difusor también está presente una ZRE. La ZRE tiene la forma de anillo y aparece por un cambio brusco en la sección del quemador. Si se consigue que la geometría del difusor evite las zonas de depresión del fluido se consigue reducir las pérdidas al evitar la aparición del ZRE. Otro inconveniente es que el flujo con gases calientes pueda incidir directamente sobre la pared.

Analizando el ZRI del caso sin difusor se observa que el flujo no es axilimétrico, este flujo gira en hélice, a diferencia del caso con difusor en el que el flujo está orientado en la dirección axial. Este efecto de hélice se denomina PVC (Precessing Vortex Core, la precesión es la tendencia a volver al punto de equilibrio) que puede aparecer en flujos rotantes. Este efecto provoca inestabilidades en el flujo. La aparición del PVC es una función del número de swirl, normalmente $S > 0,6-0,7$. Para el caso computacional mostrado el swirl es de 1,2. Otros factores que influyen en la aparición del PVC son: el modo de entrada de combustible, la configuración de la cámara de combustión y el dosado. En distintos estudios se ha demostrado que la entrada de combustible axial normalmente suprime la amplitud PVC (Syred, 2005).

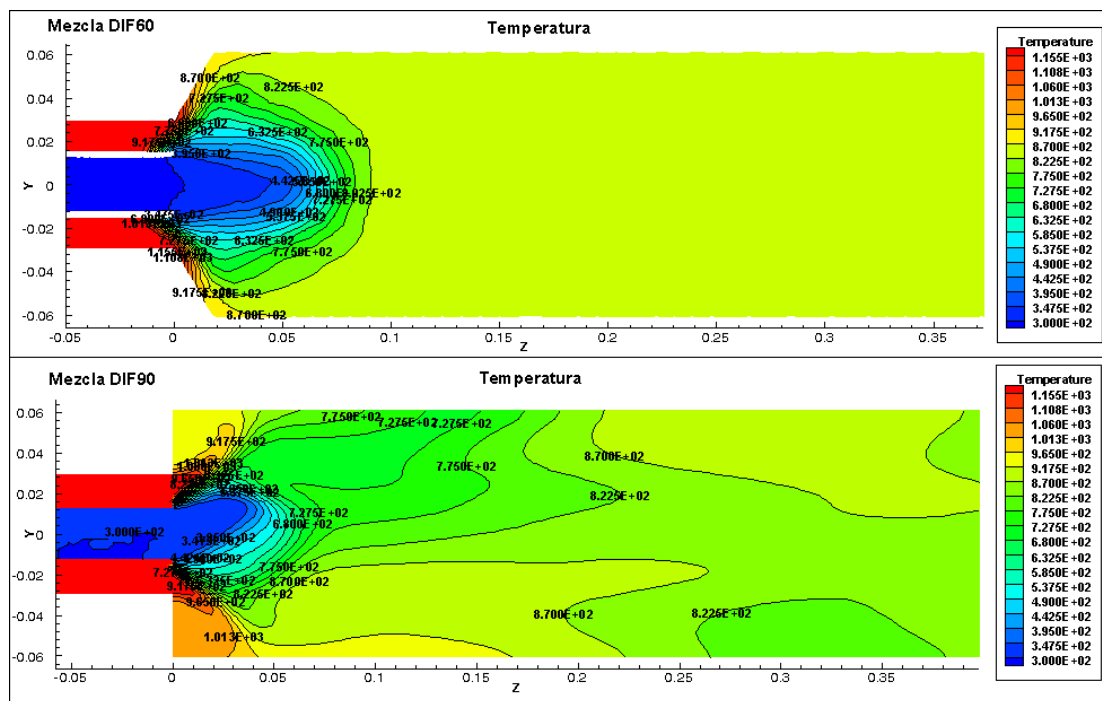


Figura 4. 2 Contorno de temperaturas para mezcla.

Hay que destacar que a pesar de las demostraciones realizadas por Syred, en las que indica que colocando de forma axial la entrada del combustible normalmente se suprime el PVC, en este caso no ocurre aunque la entrada es axial, el generador de swirl provoca la rotación. Esto es debido al cambio brusco de sección que como se puede ver en el contorno de temperaturas hay diferentes gradientes según la zona del ZRE. Al ser un flujo no premezclado la interacción entre el combustible y el oxidante se realiza en la cámara y no previamente por tanto la mezcla no es totalmente homogénea. También hay que tener en cuenta el elevado número de swirl que lanza al flujo más rápido provocando que el fluido no se pueda adaptar a la geometría del quemador, esto provoca que la distribución

de temperaturas en los primeros milímetros no sea homogénea, esto influye en la diferencia radiales de temperaturas al principio del quemador y por tanto de la densidad. En cada sección radial el flujo empuja de distinta manera, esto es lo que provoca que el flujo no sea axilsimétrico.

Hay casos en los que el PVC puede mejorar la eficiencia de la combustión a través de su mejora de intensidad de la turbulencia y mezcla. El aspecto negativo surge a la posibilidad del acoplamiento de la resonancia con la oscilación acústica de baja frecuencia en la cámara de combustión que influye en el aumento de los productos de combustión tales como el CO_2 y el NO_x (Huang, 2009).

Teniendo en cuenta esto, se propondrá para futuros proyectos la inclusión de un chorro coaxial a la entrada del quemador de un quemador sin difusor para estudiar cómo influye en la resonancia, ya que según Jeongseog Oh al introducir este flujo coaxial en un flujo no premezclado, la llama se estabiliza y produce menos NO_x y un aumento de temperatura. (Oh, 2009)

Para mostrar mejor este efecto se incluye la figura 4.3 que a pesar de representar un flujo no axilsimétrico para combustión se ve claramente el efecto que tiene en el flujo el PVC.

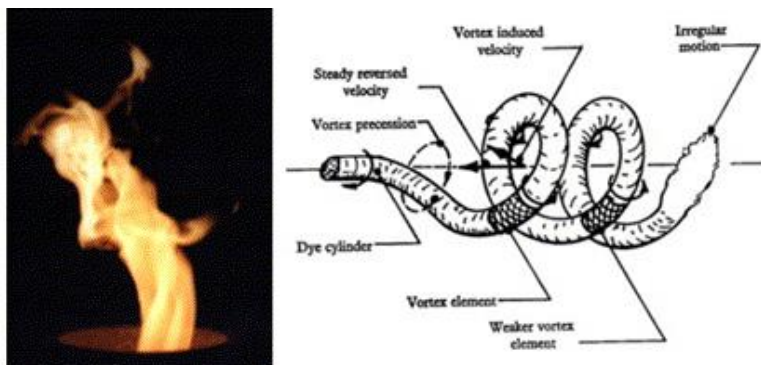


Figura 4. 3 Representación del PVC para combustion. (Syred, 2005)

Para saber la energía que se consume en ambos casos se recurre a la viscosidad turbulenta (Figura 4. 4).

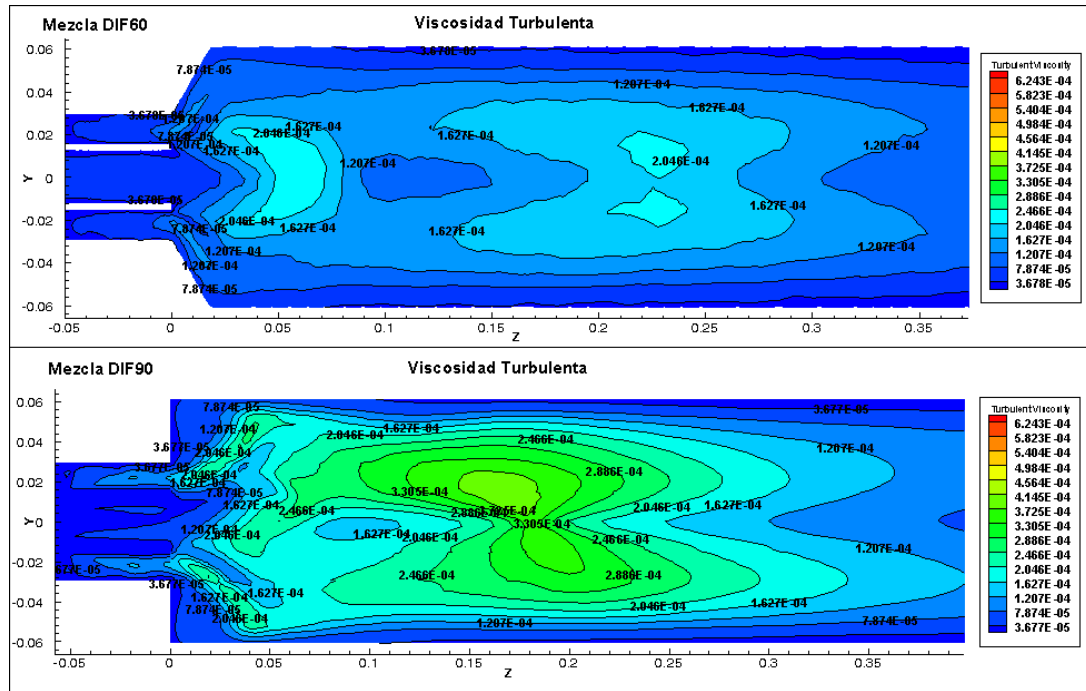


Figura 4. 4 Perfil de viscosidad turbulenta para mezcla.

Se aprecia claramente el efecto que tiene el PVC, se puede ver un patrón de flujo toroidal a 200 mm, esto supone un aumento considerable de la interacción en el flujo que provoca muchas pérdidas por disipación viscosa.

4.1.2 CASO COMBUSTIÓN

Se activa la combustión para ver cómo afecta el uso del difusor.

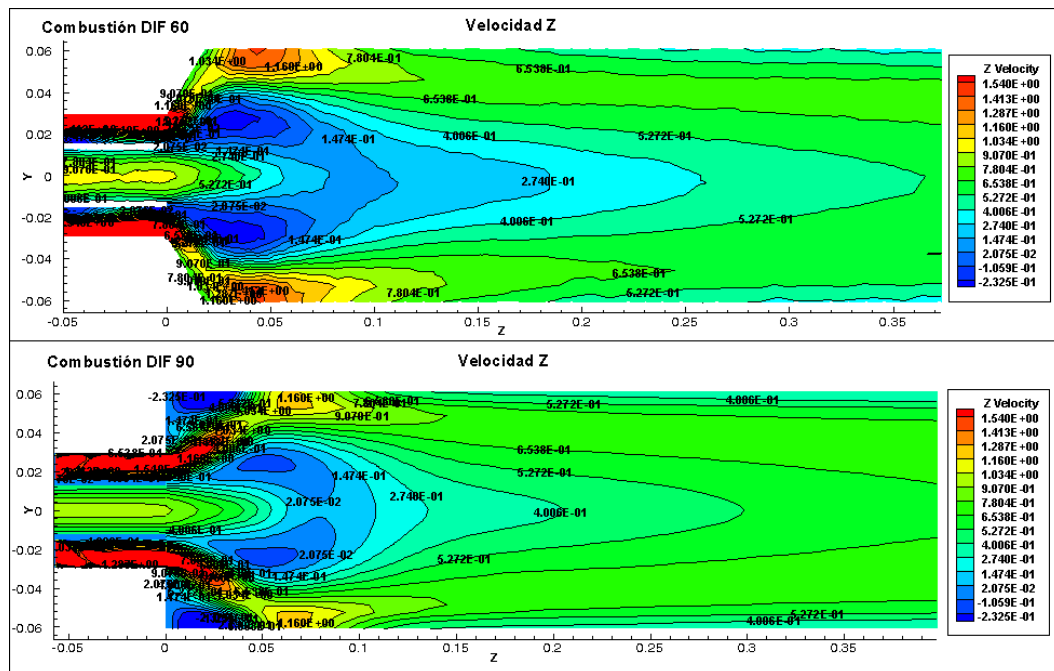


Figura 4. 5 Perfil de temperaturas para combustión.

En el caso de la combustión sigue existiendo ZRE y ZRI para el caso sin difusor y ZRI para el quemador con difusor (*Figura 4. 5*). La diferencia es que el flujo es más homogéneo para ambos casos. Al reducir ZRI se consigue aumentar la velocidad del flujo en general, sin embargo las ZRE siguen siendo demasiado grandes, ligados al elevado número de swirl.

- Debido a la combustión el PVC del modelo sin difusor desaparece.
- El swirl influye en el ZRI
- La expansión brusca en ZRE
- ZRE puede estar afectado por ZRI que al ser mayor en tamaño pueda confinarla.

Con los casos estudiados se puede comprobar que el swirl cambia según la geometría del quemador. Para el modelo que tiene el difusor de 90° el swirl es de 1.2 mientras que para el caso del difusor de 60° el swirl es de 1.4. Este aumento del número de swirl es debido a que se obliga al flujo a ir en dirección axial, con ello la energía del flujo se emplea en generar el torbellino. En el caso del difusor de 90° hay energía que se pierde en el ZRE y por tanto hay menos energía disponible para el torbellino.

En el caso de la varianza de la mezcla es mayor para el caso sin difusor. Esto se traduce en que se consigue que todos los productos de la reacción y de la combustión se consumen y aumentan más rápido para el caso sin difusor, pero a la salida del quemador el valor de los productos es igual para los dos casos.

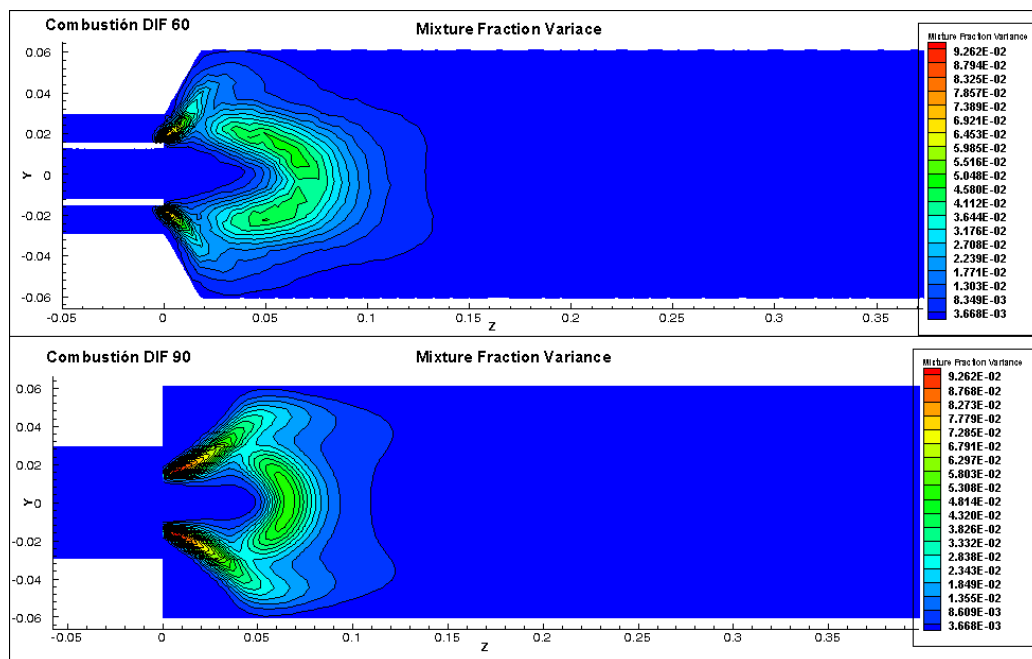


Figura 4. 6 Contorno de MFV para combustión.

En la *Figura 4. 7*, se muestra el contorno de temperaturas en los quemadores. En el caso del difusor el gradiente de temperaturas tiende a aumentar de manera axial a la salida de la tobera, mientras que para el caso sin difusor los gradientes aumentan de manera radial, esto se refleja en el aumento de temperatura de los gases en las paredes del quemador.

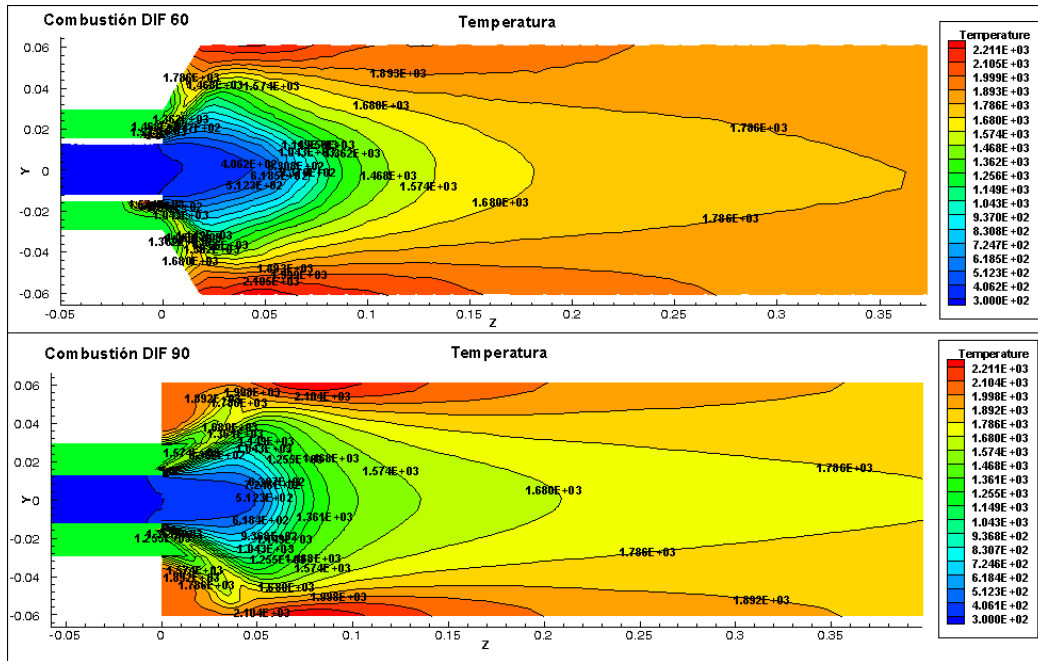


Figura 4. 7 Contorno de temperaturas para combustión.

Para este caso sin difusor las temperaturas que se alcanzan en las paredes son mayores y la superficie que ocupan también lo es, que a pesar de estar representado por distintos colores el valor es el mismo, por tanto el uso del difusor muestra claros beneficios, ya que el quemador está sometido a menor temperatura en las paredes. Para ambos casos la temperatura de salida del quemador es la misma. (*Figura 4. 8*)

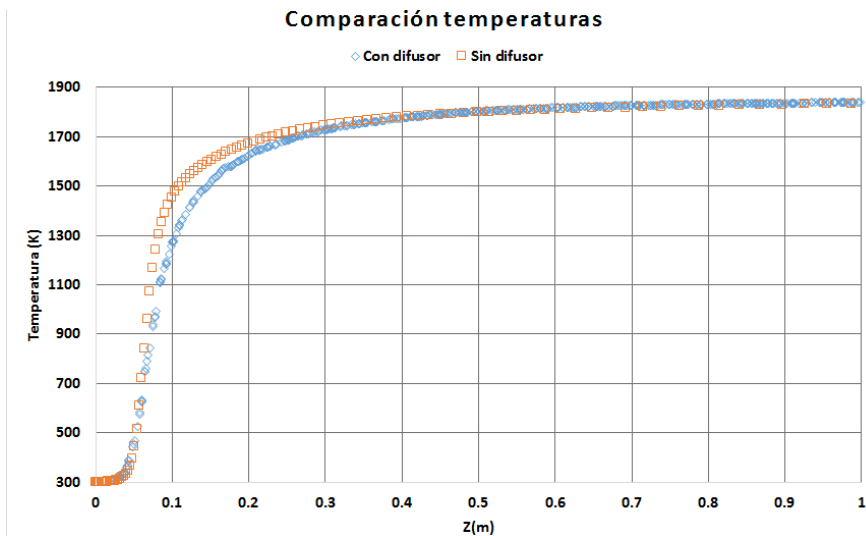


Figura 4. 8 Perfil de temperaturas a lo largo del eje z.

En vista de los resultados obtenidos en posteriores capítulos de este trabajo se empleará el quemador con difusor, por los motivos antes mencionados, que a modo de resumen son:

- a) El modelo con difusor tiene menos celdas, el tiempo de cálculo es menor.
- b) Las temperaturas en las paredes del quemador son menores.
- c) No se pierde la energía en las ZRE, es decir, se invierten en aumentar la temperatura del flujo, de ahí el gradiente de temperaturas en el eje z es mayor.

4.1.3 COMPARACIÓN COMBUSTIÓN Y MEZCLA

Una vez terminada de explicar las diferencias entre los flujos con difusor y sin difusor, se procede a comparar cómo influye en la combustión, en el campo fluido.

4.1.3.1 Con difusor

El modo de proceder para analizar la combustión y mezcla será comprobando las velocidades axiales en secciones transversales a lo largo del eje axial.

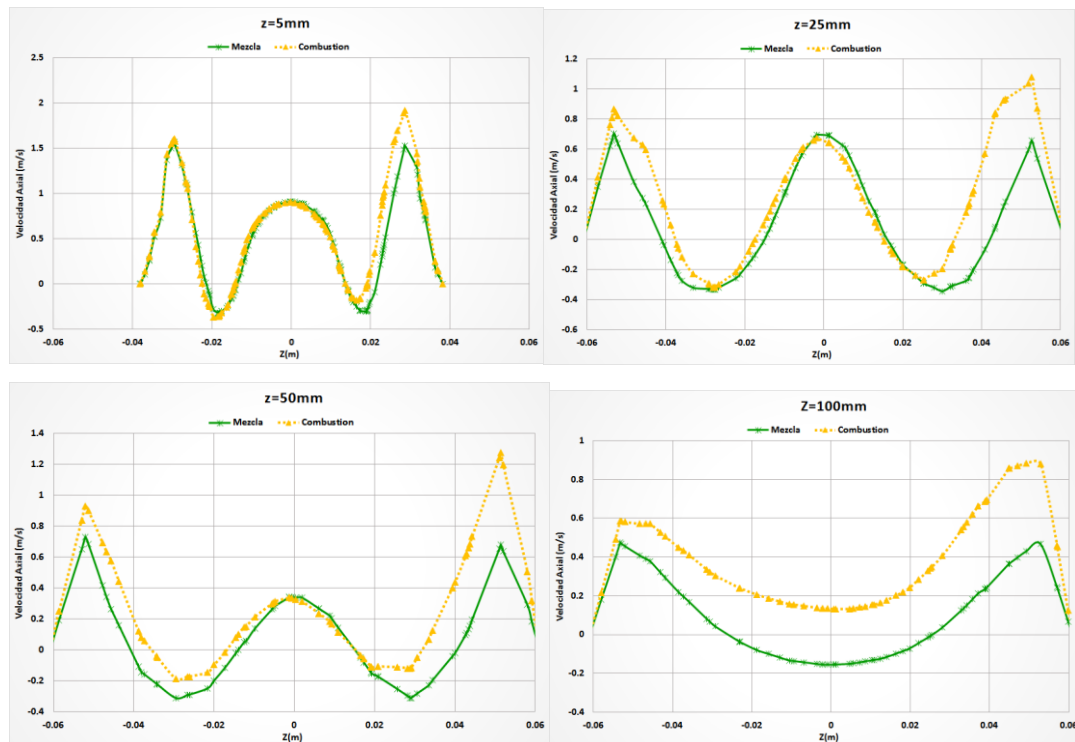


Figura 4. 9 Perfiles radial de velocidad axial en la sección Z = 5, 25, 50, 100 mm con difusor.

En la *Figura 4. 9* se puede apreciar un notable aumento de velocidad a medida que se aleja del punto de salida del combustible y oxidante en comparación con la mezcla, debido al aumento de temperatura y a la necesidad de satisfacer el balance de masa.

4.1.3.2 Sin difusor

Para este apartado se realiza lo mismo que en el caso del modelo con difusor. Aquí habrá que tener en cuenta que las diferencias serán mayores debido a que como se mencionó anteriormente la combustión estabiliza el flujo haciendo desaparecer el PVC.

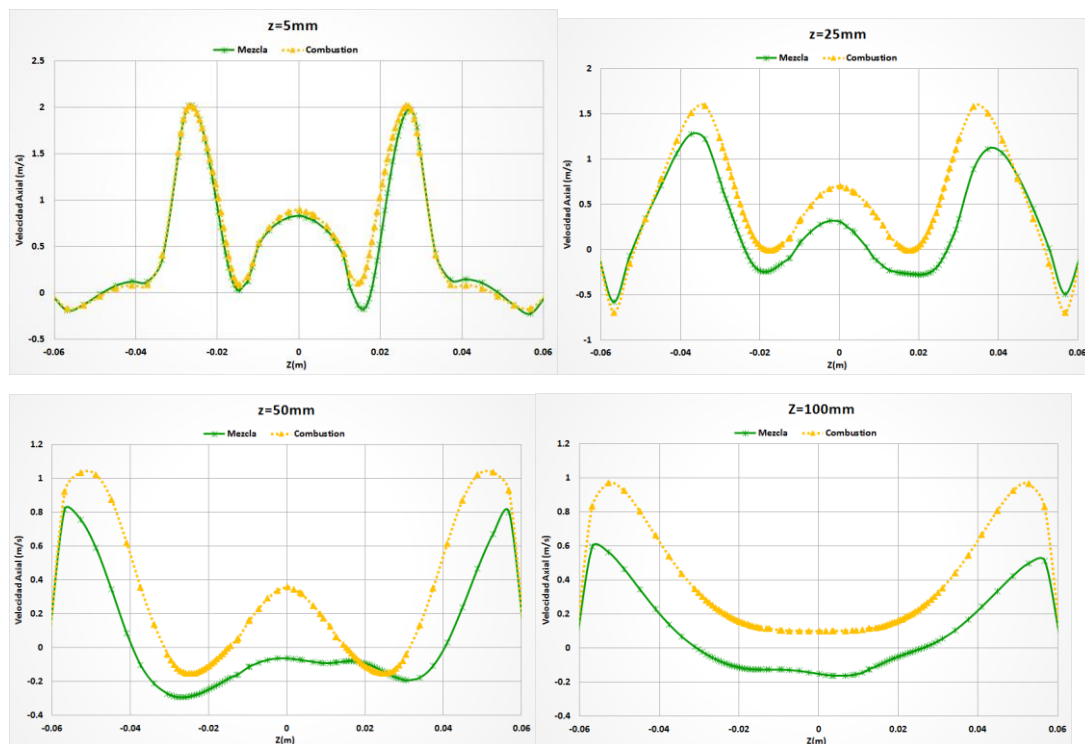


Figura 4. 10 Perfiles radial de velocidad axial en la sección $Z = 5, 25, 50, 100$ mm sin difusor.

En la *Figura 4. 10* ocurre lo mismo que en el modelo con difusor. Al activar la combustión se puede ver que el perfil de velocidades axiales es simétrico a diferencia de la mezcla. En la mezcla se puede apreciar el efecto elíptico que tiene en el flujo el PVC. Según la distancia axial que se estudie la zona de recirculación cambia de posición. La velocidad del flujo en la tobera central aumenta bastante, como se ha mencionado, por el aumento de la temperatura. En $z = 50$ mm se observa que ya no existe ZRI para combustión y aún persiste en mezcla.

4.2 MODELO DE COMBUSTIÓN ED

Una vez explicados los beneficios del uso del difusor, se empleará este tipo de difusor en el modelo de combustión ED.

En la *Figura 4. 11* se puede ver que las diferencias en el caso del perfil de velocidades son pocas teniendo en cuenta que son modelos cuya formulación es bastante distinta. Hay que mencionar que el ZRI es menor y las zonas de recirculación son mayores para el caso del modelo ED.

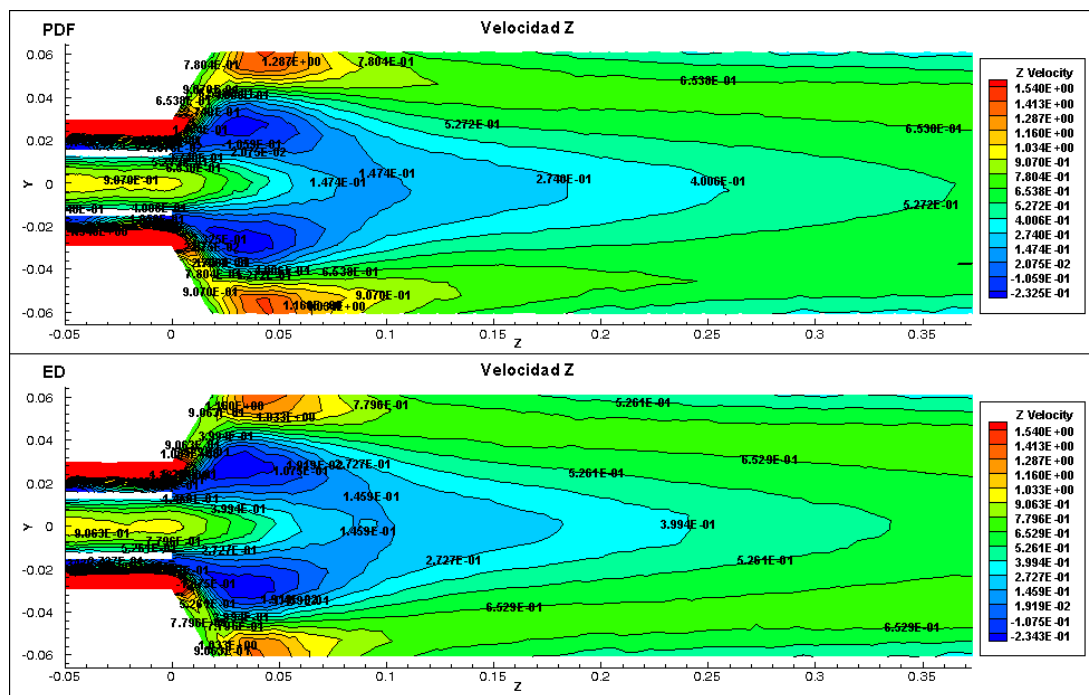


Figura 4. 11 Contorno de velocidades para el modelo PDF y ED.

La diferencia más notable está en la comparación de los contornos de ambos en los primeros 100 mm de la cámara, donde se produce la combustión. Se puede apreciar que con el caso ED los contornos de las zonas donde choca el flujo radial con las paredes son menos suaves, esto es debido al efecto que tiene la combustión dominada por la turbulencia con una única ecuación para la resolución del mecanismo de liberación de calor.

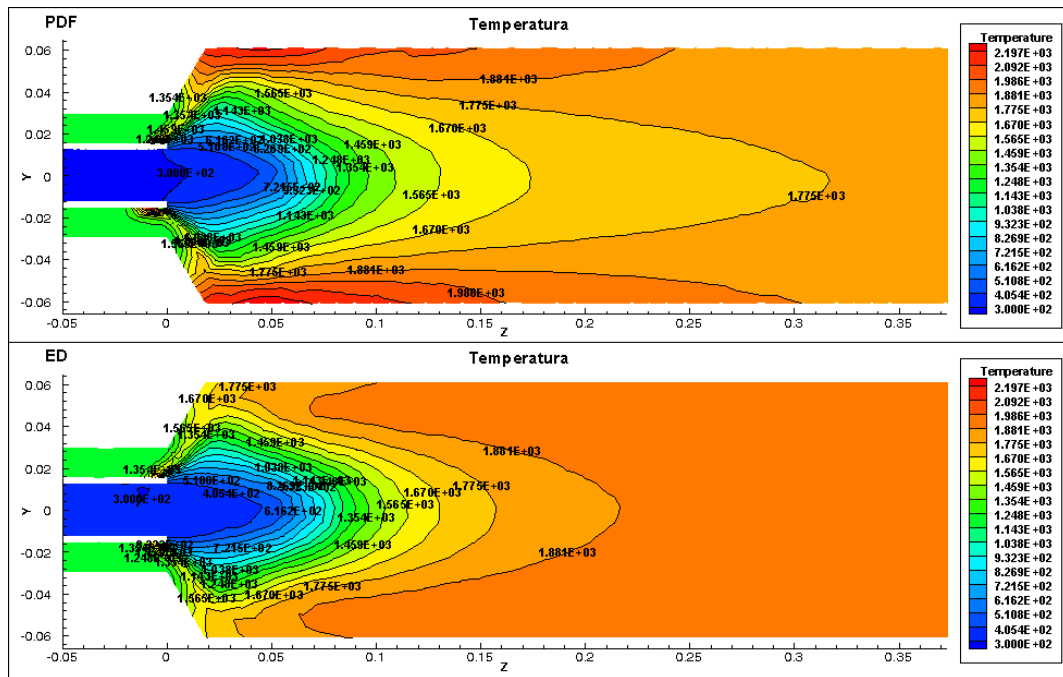


Figura 4. 12 Contorno de temperaturas para el modelo PDF y ED.

En el contorno de velocidades se mencionó que no había muchas diferencias, al ver el perfil de temperaturas se puede ver que sí que influye tener una ecuación. Para el caso del PDF las velocidades de reacción son determinadas por las expresiones cinéticas de Arrhenius algo que no ocurre con el ED que no las tiene en cuenta.

En el modelo ED el perfil de temperaturas es muy homogéneo, el cual desarrolla la combustión a lo largo del eje axial, no hay acumulación de los gases quemados en las paredes como en el modelo PDF.

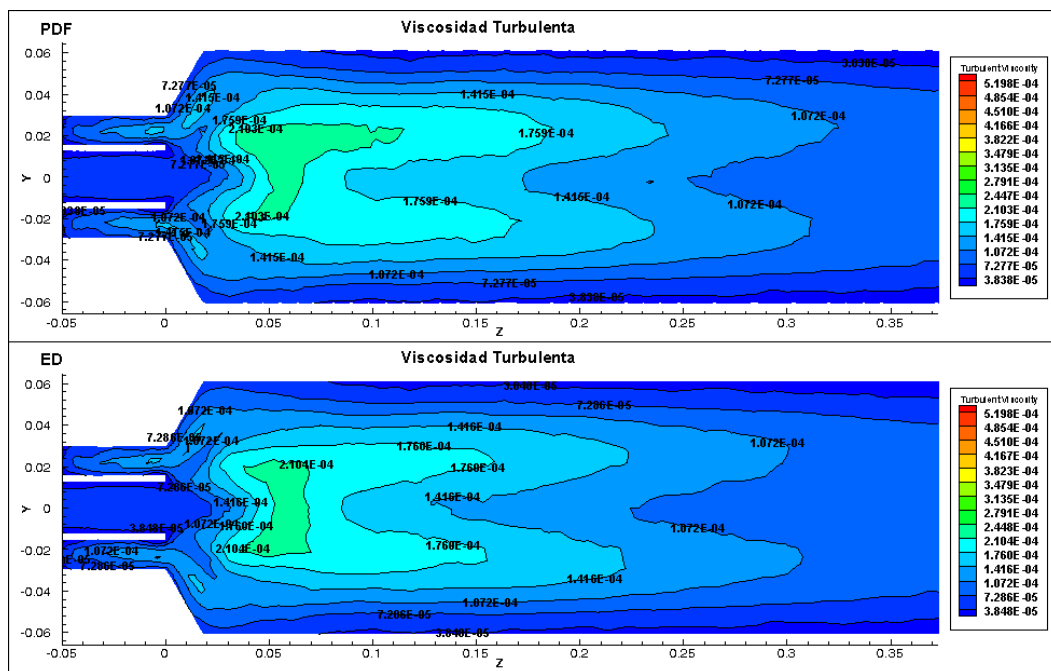


Figura 4. 13 Contorno de la viscosidad turbulenta para el modelo PDF y ED.

Anteriormente se indicó que este modelo solamente es un paso para facilitar la convergencia del modelo EDC. Esto es debido a que como se puede ver en el perfil de temperaturas del ED es muy simple, tiene pocas reacciones de combustión, no se llega a alcanzar la precisión necesaria.

En términos de energía perdida por disipación viscosa turbulenta (*Figura 4. 13*) ambos modelos están bastante próximos.

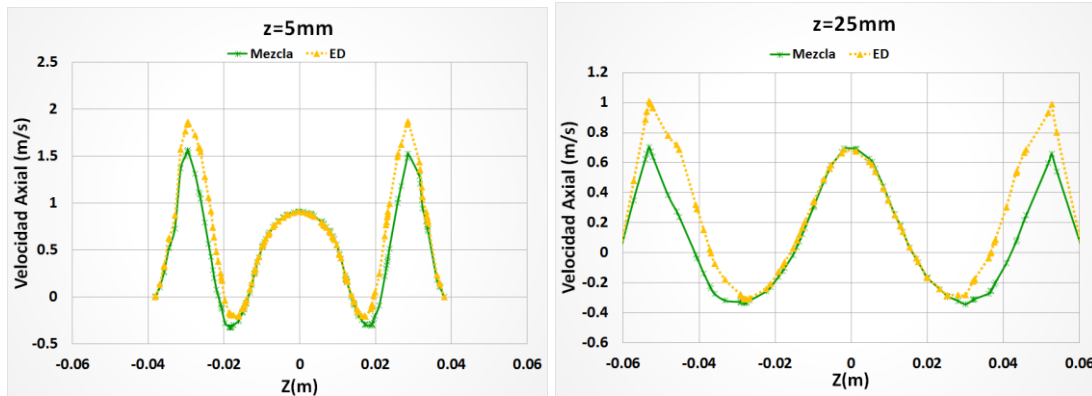


Figura 4. 14 Perfiles radial de velocidad axial en la sección $Z = 5, 25$ mm con difusor ED.

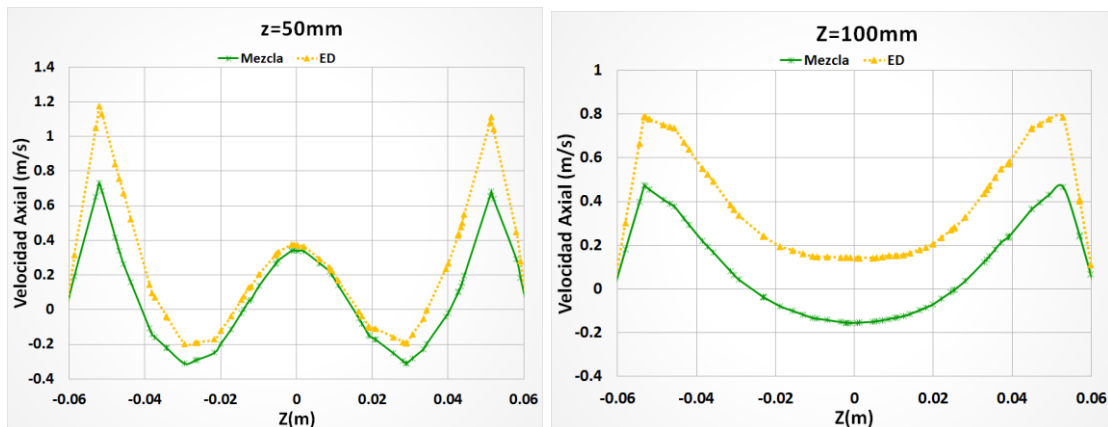


Figura 4. 15 Perfiles radial de velocidad axial en la sección $Z = 50, 100$ mm con difusor ED.

Se incluye la *Figura 4. 14* y *Figura 4. 15* para ver de manera más clara el efecto que tiene un modelo tan simple en la combustión. Los perfiles son casi idénticos los 50 primeros milímetros lo único es que tiene mayor velocidad en posiciones radiales. A partir de los 100 mm el contorno es semejante pero con mayor velocidad.

Con esto se puede concluir que este modelo solo es un paso intermedio.

4.3 MODELO DE COMBUSTIÓN EDC

Para este modelo se utilizan los cálculos una vez convergidos del modelo ED.

Con este modelo se empleó el algoritmo ISAT que se utiliza para reducir el tiempo de cálculo de las reacciones.

Al proceder al cálculo de las iteraciones se observa que la temperatura disminuye, es decir, no se está produciendo la combustión. Esta estrategia no ha tenido éxito y no ha producido resultados realistas por lo que se propondrá para futuros proyectos este modelo de combustión.

En vista de los resultados obtenidos en el ED y EDC se apuesta por el modelo PDF ya que se puede ajustar muy bien a los requerimientos de cada modelo. El quemador empleado será el difusor de 60°.

5 Capítulo

INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA Y EL
DOSADO

5.1 INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA DEL COMBUSTIBLE EN LA COMBUSTIÓN

El este apartado se trata de estudiar el efecto que provoca variar la temperatura de entrada del combustible entre 300K, 350K y 400K, dejando fija la temperatura del aire en 1200K para el caso del quemador con difusor de 400.000 celdas y modelo PDF. Para cada caso se crea una tabla específica.

El objetivo que se persigue es encontrar una temperatura óptima en la cual se pueda ahorrar combustible y mejorar la eficiencia de la combustión.

Este estudio se comparará con los resultados obtenidos por Vigor Yang que presenta en el artículo “Bifurcation of flame structure in a lean-premixed swirl-stabilized combustor: transition from stable to unstable flame” (Yang, 2003)

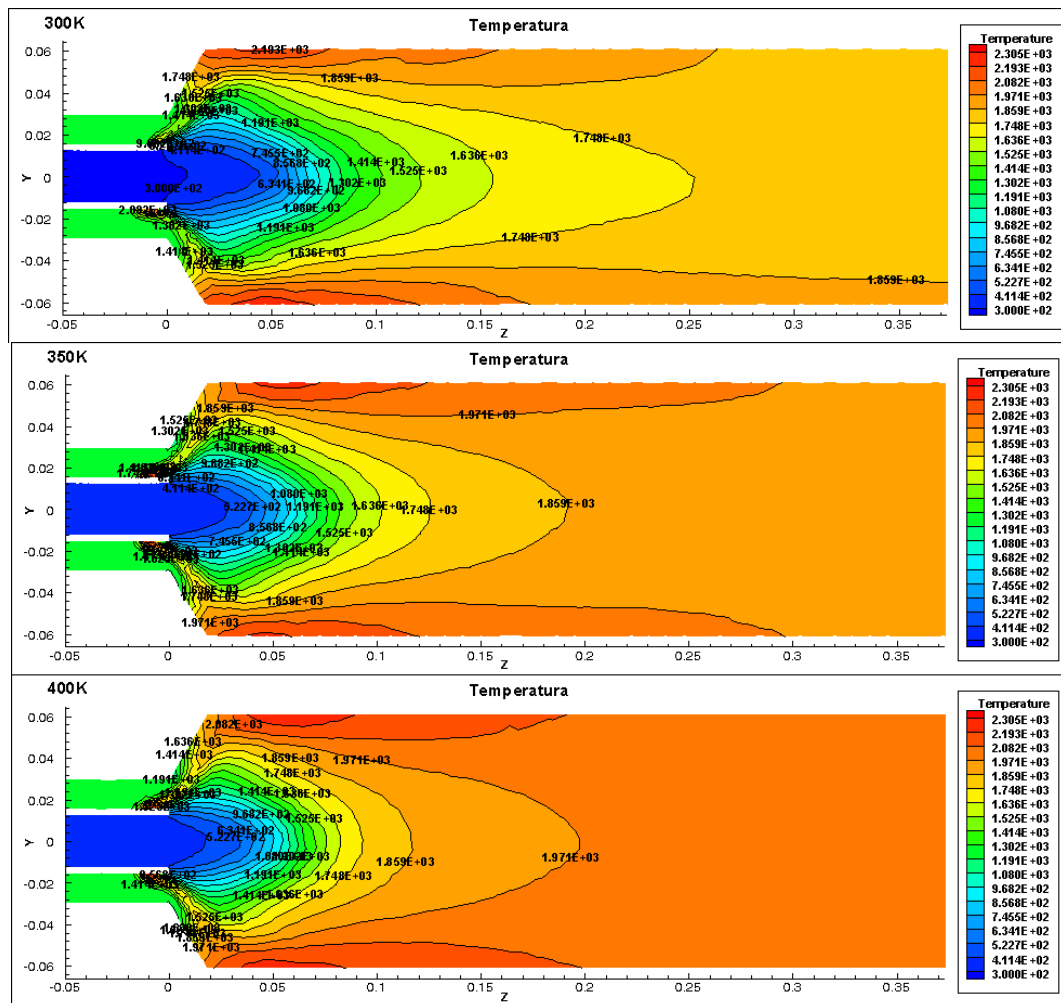


Figura 5. 1 Representación de contornos de temperatura con temperaturas de combustible 300K, 350K y 400K.

Al aumentar la temperatura de entrada del combustible lo primero que se observa es un aumento de los gradientes de temperatura (*Figura 5. 1*). En el capítulo 3 se mencionó que los gases calientes tendían a localizarse en las paredes una vez que se producía la combustión al utilizar el modelo PDF. Al aumentar la temperatura del combustible también lo hacen los gases acumulados en las paredes, con ello se aumenta la superficie del quemador sometida a gran temperatura. En las conclusiones se analizará si merece la pena el aumento de temperatura en las paredes del quemador.

Con esta variación de temperatura se consigue que la temperatura general de los gases quemados aumente unos 200 grados por cada 100 de combustible. Para el caso de aplicaciones industriales tales como altos hornos, este incremento de temperatura inicial del combustible con una simple resistencia puede suponer un ahorro muy grande de energía.

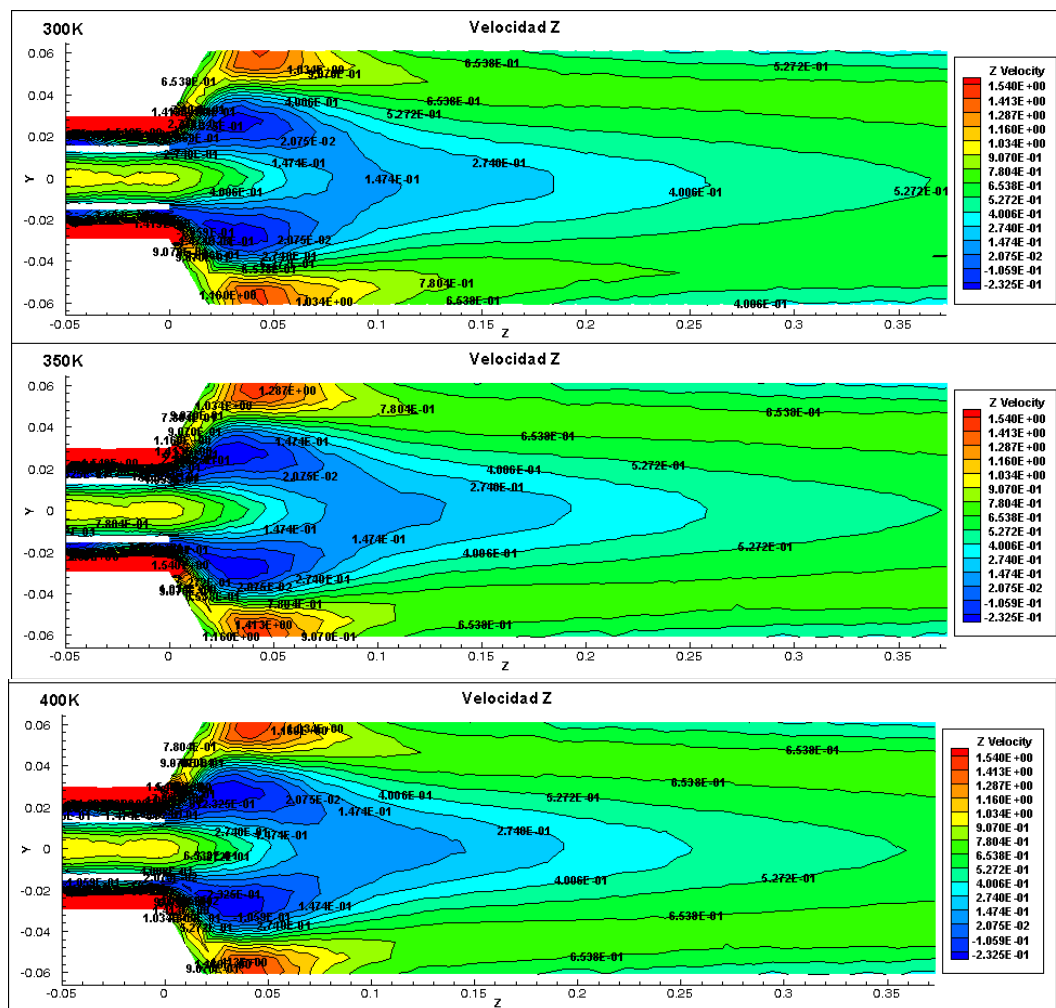


Figura 5. 2 Representación de contornos de velocidad axial para temperaturas de combustible 300K, 350K y 400K.

Al aumentar la temperatura se incrementa la velocidad del flujo. Esto se puede apreciar en el aumento de la zona de recirculación y de los torbellinos que chocan contra las paredes (*Figura 5. 2*). El ZRI se mantiene igual.

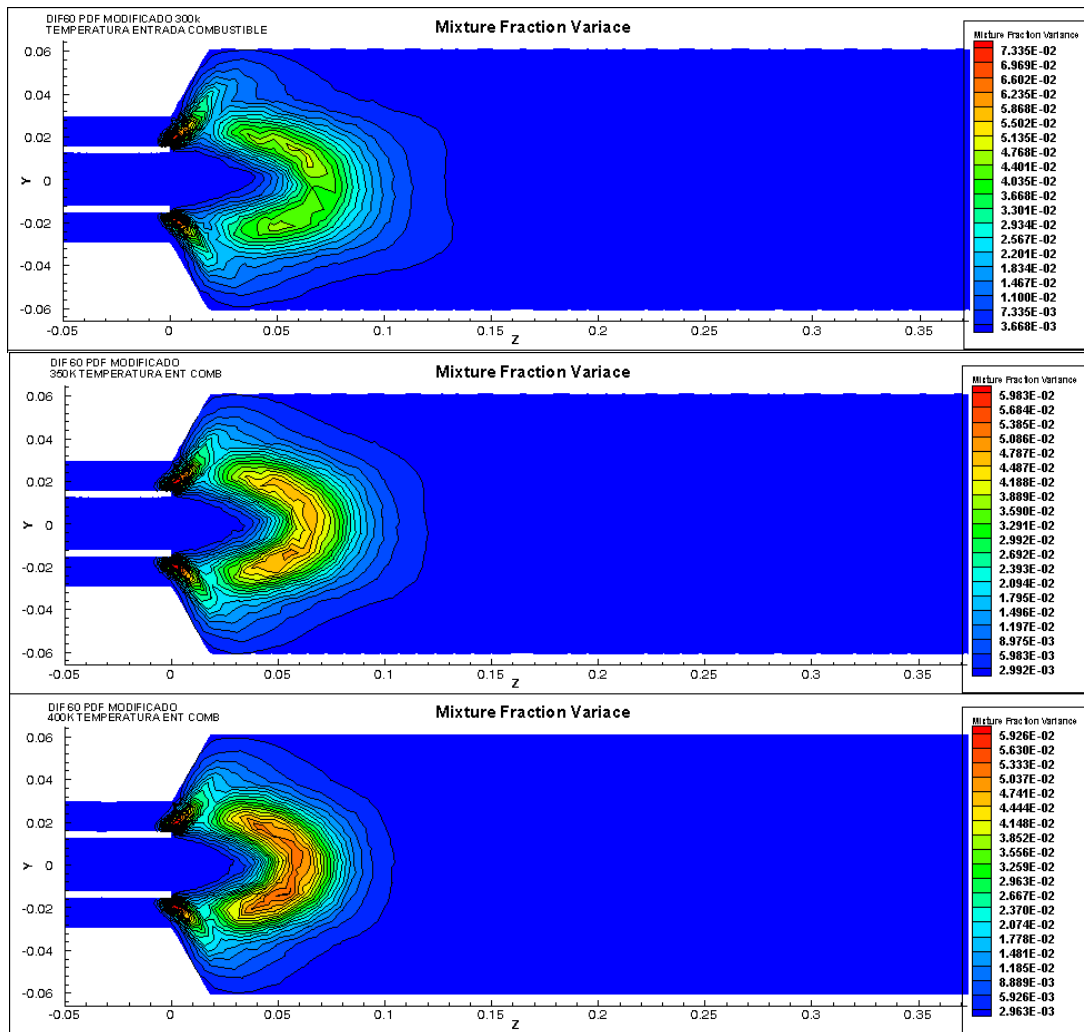


Figura 5. 3 Representación de contornos de MFV para temperaturas de combustible de 300K, 350K y 400K.

En la *Figura 5. 3* se puede ver que el aumento de temperatura, aumenta la varianza de la fracción de la mezcla, con ello se consigue una mejor mezcla entre los compuestos, esto lleva a una mejor combustión, como se puede ver en la *Figura 5. 4*, la zona de frente de llama se consigue acotarla de 100 mm a 40 mm. El metano se quema un 16,3% más para el caso de 350K y un 25% más para el caso de 400K (ambos en comparación con el caso de 300K a una distancia de 0,3 metros y un 5% más para 350K y un 10,5% más para el caso de 400K a la salida de la cámara de combustión. Los productos de combustión tales como el CO, el CO₂ y el agua no llegan a aumentar un 5% para el caso de 400K en comparación con el de 300K. En la *Figura 5. 2* la zona de recirculación aumenta, por

consiguiente la mezcla del aire con el combustible mejora. En la *Figura 5. 4* se representan estos datos para una mejor visualización.

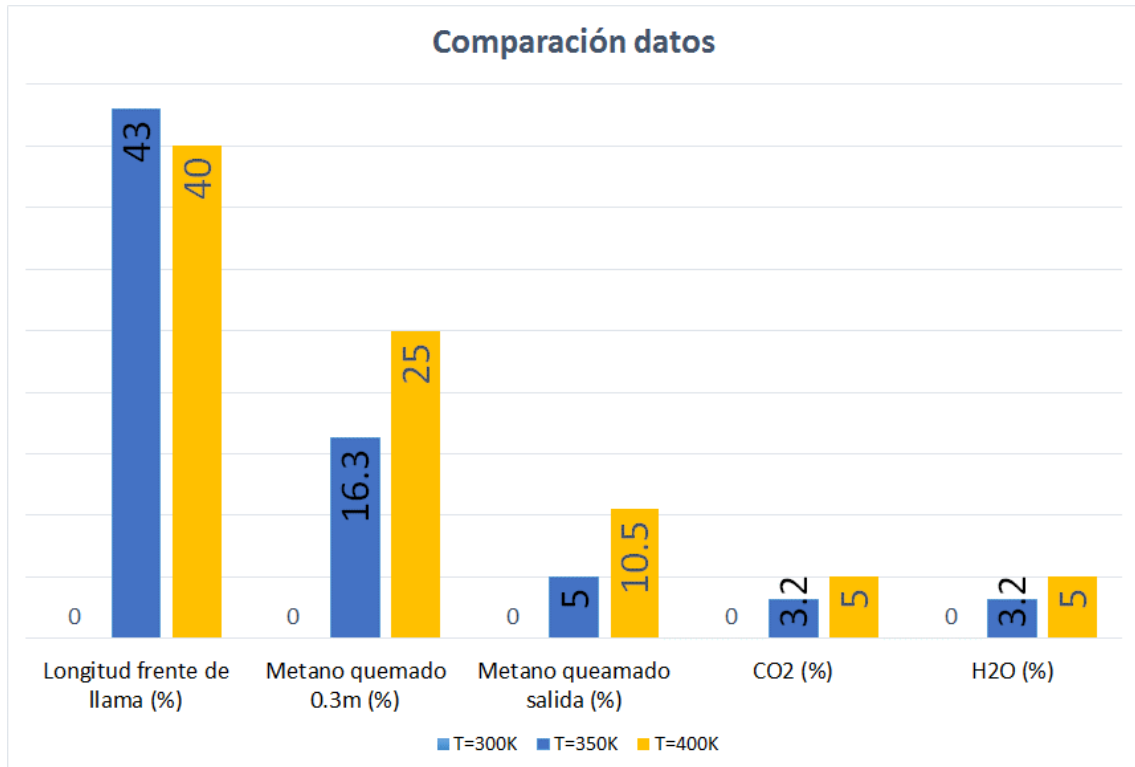


Figura 5. 4 Comparativa datos con la variación de temperaturas de metano.

Las estructuras químicas de las llamas sobre el eje del quemador se representan en las *Figura 5. 5*, *Figura 5. 6* y *Figura 5. 7*.

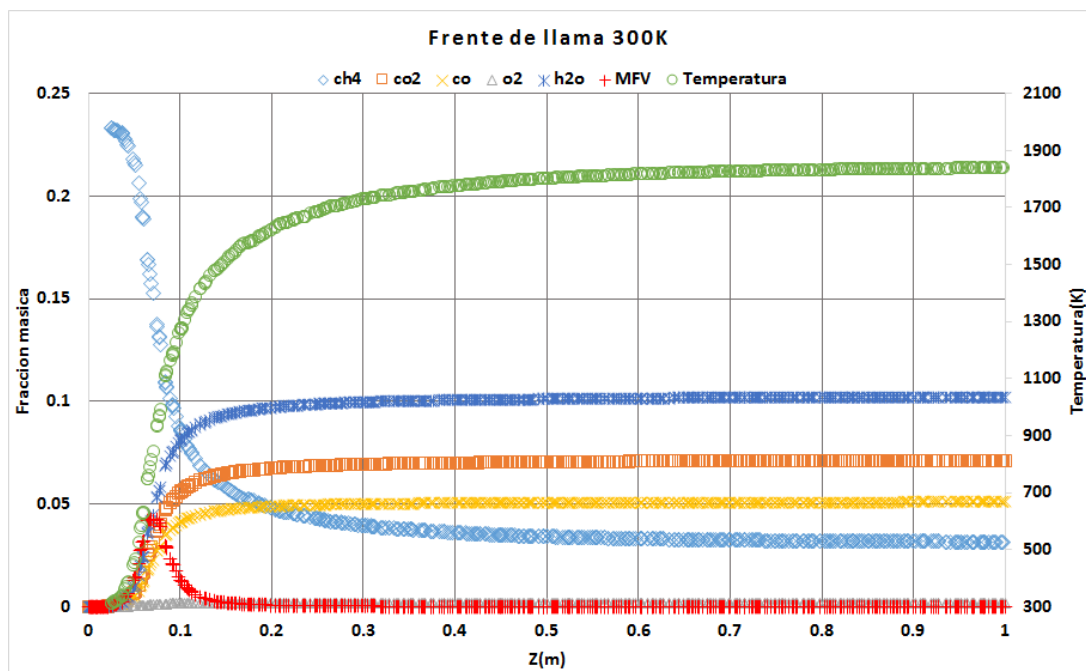


Figura 5. 5 Representación productos y reactivos de la combustión del metano para temperatura de entrada del metano a 300K.

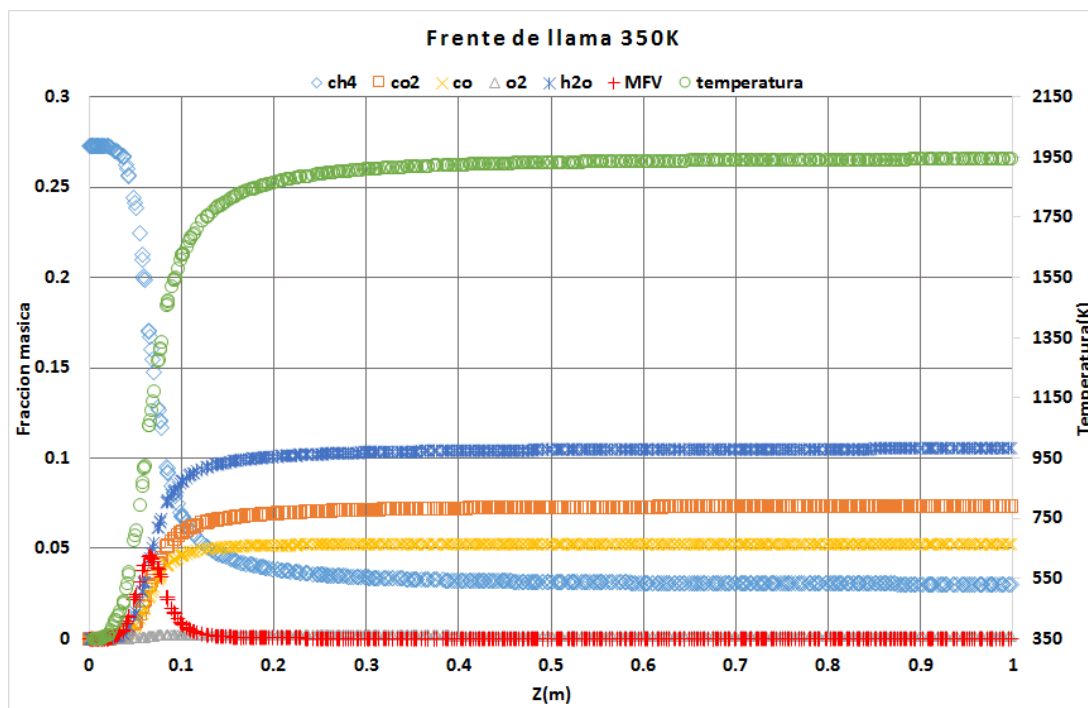


Figura 5. 6 Representación productos y reactivos de la combustión del metano para temperatura de entrada del metano a 350K.

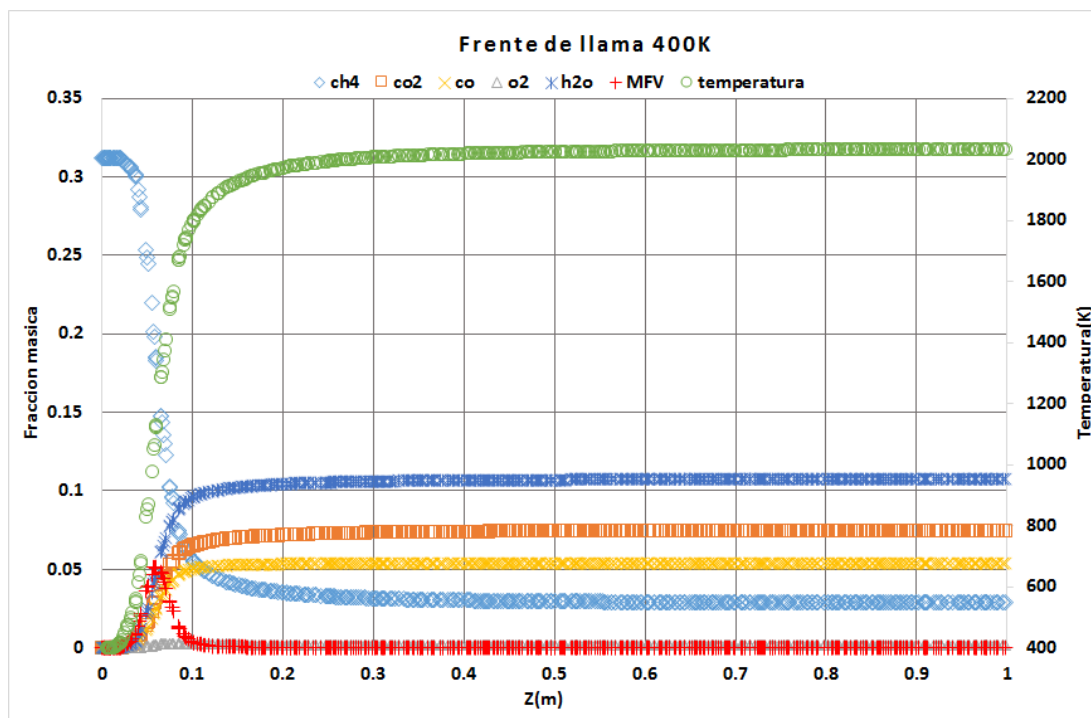


Figura 5. 7 Representación productos y reactivos de la combustión del metano para temperatura de entrada del metano a 400K.

Al ver las figuras se puede apreciar que la mezcla no llega a ser estequiométrica debido a que no se llega a quemar todo el combustible, queda un 2% de fracción másica sin quemar. Esto es debido a que el modelo PDF como se explicó en el capítulo 2 predice la fracción

másica media y su varianza en un flujo turbulento, es por tanto por lo que no llega al 0, ya que es una media. Esto se puede comprobar en la *Figura 5. 8* en la que se muestra la fracción másica del metano para el modelo de combustión ED, el cual calcula la tasa de reacción de cada especie a una misma velocidad.

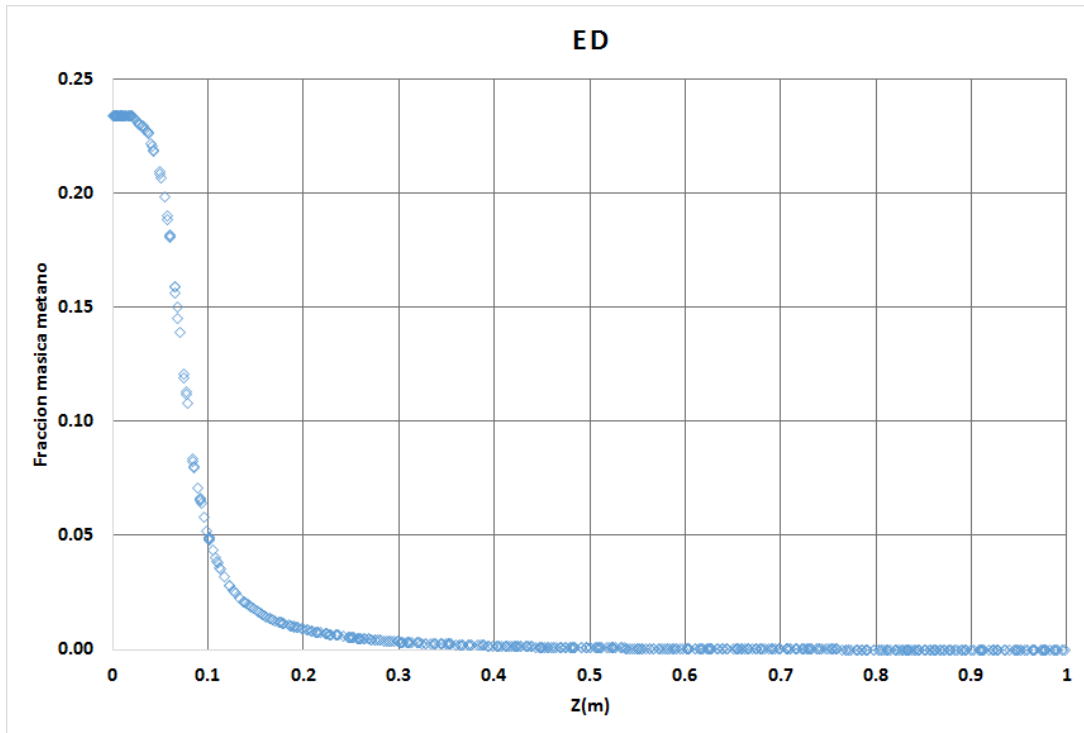


Figura 5. 8 Representación fracción másica metano para ED.

A pesar de que este modelo no llega a quemar todo el combustible sirve como comprobación de que al aumentar la temperatura se quema más combustible (figura 5.4), por tanto, es más eficiente desde el punto de vista de la cantidad de combustible que entra y la cantidad que se quema.

Respecto a la acumulación de gases calientes en las paredes, esto supone un problema, pero la solución sería cambiar el material del quemador por uno que aguante sin problemas ese incremento de temperatura, ya que refrigerar las paredes restaría temperatura a los gases de salida.

Se puede concluir que los beneficios que tiene aumentar la temperatura, son mayores que los puntos negativos.

Una vez terminado el análisis de los modelos simulados comprobamos los resultados con el experimento de Vigor Yang. Hay que mencionar que en dicho experimento (Yang, 2003) la variación de temperaturas se hace entre 600K y 660K de un flujo premezclado en un quemador sin difusor. En el artículo se explica que al aumentar la temperatura de

entrada de la mezcla, para una tasa de flujo de masa fija, la velocidad de flujo también aumenta y empuja la llama aguas arriba. Por otro lado, el aumento de la temperatura de entrada conduce a un aumento en la velocidad de la llama y por consiguiente hace que la llama se propague aguas abajo.

En el modelo computacional realizado para este trabajo se puede apreciar que al aumentar la temperatura la variación de la mezcla que se interpreta como el frente de llama se compacta a medida que se aumenta la temperatura. La ZRI se mantiene constante, en el flujo no se aprecia que avance aguas abajo. Esto puede ser debido a que las temperaturas utilizadas en la simulación no eran lo suficientemente elevadas.

Debido a que el tiempo de iteración es mayor en el caso del modelo computacional sin difusor, se ha empleado el modelo con difusor. En vista de los resultados obtenidos y comparados se propondrá para futuros trabajos el estudio de la combustión con flujo no premezclado en quemadores sin difusor para estudiar como varía la ZRE y ZRI para comparar los resultados con los de Yang y ver cómo influye el flujo no premezclado y premezclado (figura 5.9). La temperatura del combustible propuesta será de 600K y 700K, ya que el metano se autoignicia a 810K, de este modo se puede estudiar el efecto del aprovechamiento de aumentar la temperatura hasta el límite de flamabilidad.

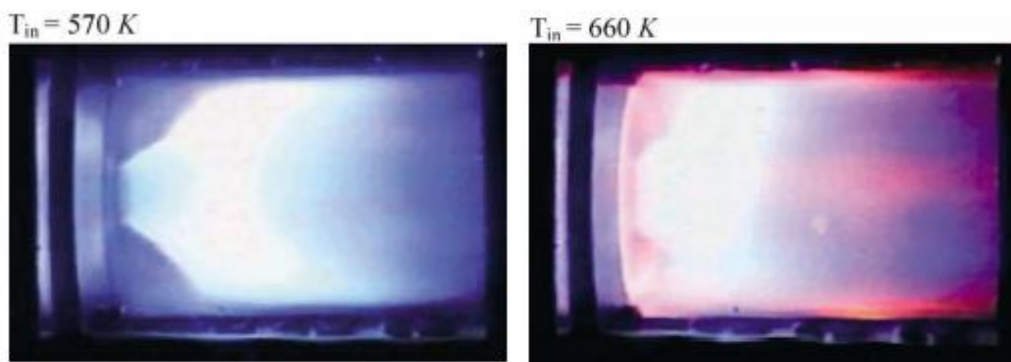


Figura 5. 9 Resultado obtenido por Yang de la variación de la temperatura de entrada de la mezcla. (Yang, 2003)

5.2 EFECTO DEL DOSADO EN LA COMBUSTIÓN

En este apartado se trata de estudiar cómo afecta variar el dosado del combustible. Para ello se compara la combustión con dosado estequiométrico, de 0.8 y de 0.6. Se analizará tanto el caso con difusor como sin difusor, para comprobar si las diferencias son notables. En ambos se utilizan modelos PDF con variación de la fracción másica según el dosado.

Al disminuir el dosado se disminuye la cantidad de combustible que se introduce en la cámara de combustión, en consecuencia aumenta la cantidad de aire que entra en la combustión.

Estos casos se compararán con los resultados obtenidos por Nazim Merlo para flujos no premezclados en el artículo “Combustion characteristics of methane–oxygen enhanced air turbulent non-premixed swirling flames” (Merlo, 2013)

5.2.1 SIN DIFUSOR

Para el modelo computacional sin difusor, al variar el dosado, no se aprecian diferencias en ninguno de los perfiles, ni en el de velocidad (Figura 5. 10) ni en el de temperatura (Figura 5. 11).

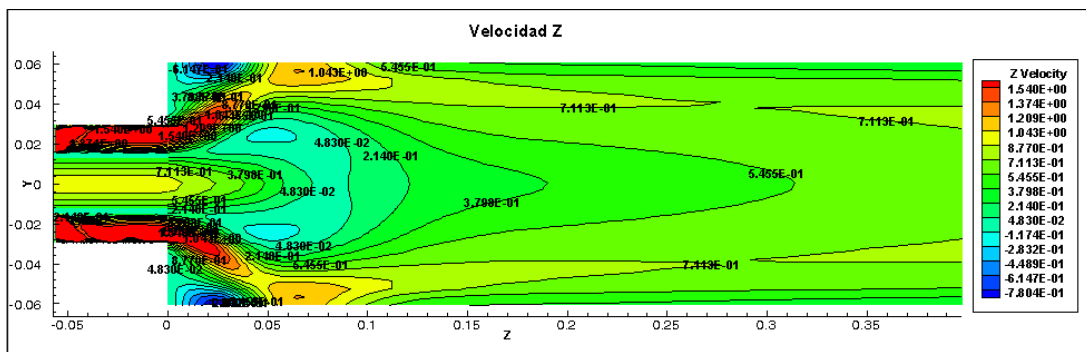


Figura 5. 10 Contorno de velocidad para dosado estequiométrico.

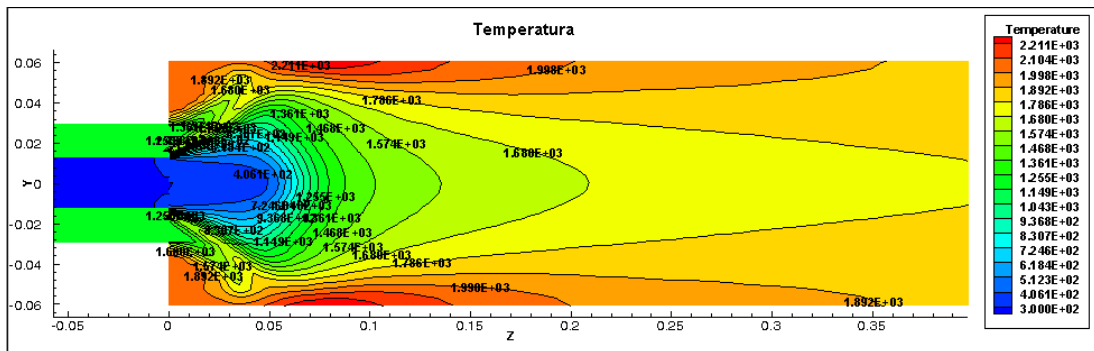


Figura 5. 11 Contorno de temperatura para dosado estequiométrico.

Tampoco influye en la temperatura final, como se puede ver en la Figura 5. 12.

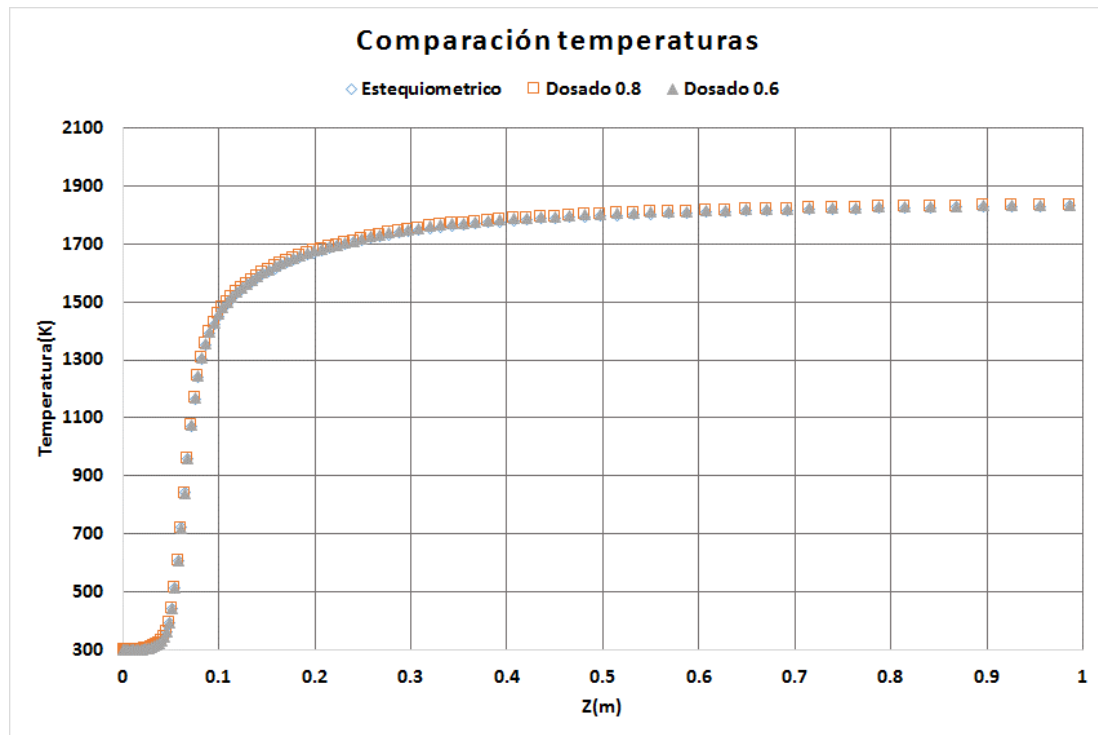


Figura 5. 12 Temperaturas a lo largo del eje z del difusor.

Al disminuir el dosado se consigue un mejor aprovechamiento del combustible, ya que se consigue quemar más metano manteniendo el resto de valores iguales para todos los casos, además del ahorro de combustible. (Figura 5. 13)

En conclusión, para el modelo sin difusor el caso más apropiado es el caso del dosado más bajo, porque la temperatura de salida de los gases se mantiene constante y conseguimos reducir el consumo de metano.

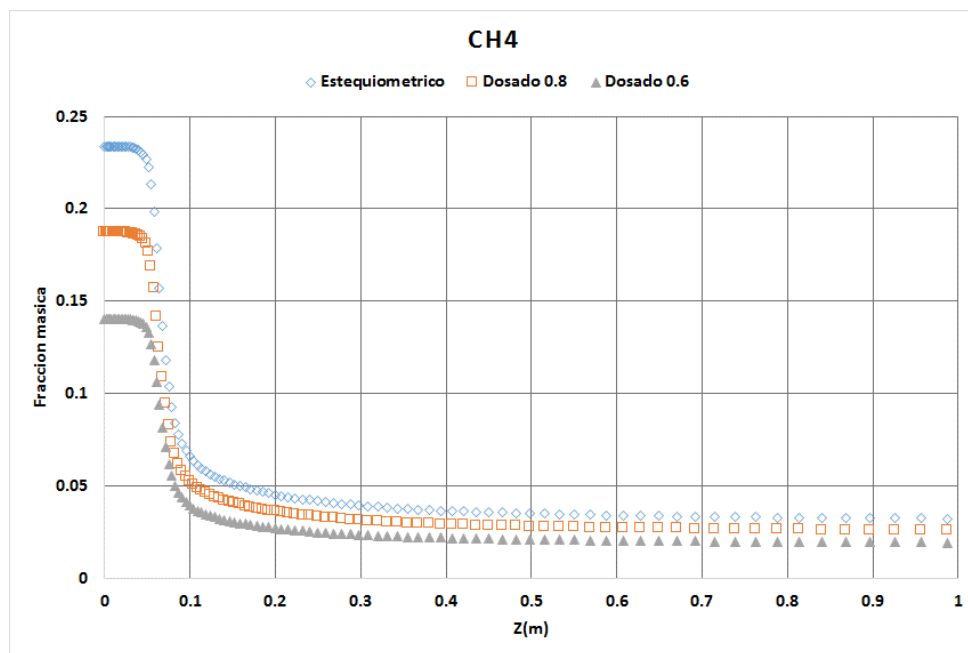


Figura 5. 13 Fracción molar de CH4 a lo largo del eje z.

5.2.2 CON DIFUSOR

En el caso del modelo con difusor, sí que se aprecian diferencias entre los distintos casos.

A medida que se disminuye el dosado, el flujo pierde velocidad (*Figura 5. 14*). Esto se puede apreciar al comparar las zonas de recirculación de los modelos. En ellos el caso estequiométrico presenta mayor velocidad de flujo, siendo el gradiente de velocidad de las zonas de recirculación mayores. Sin embargo la ZRI disminuye notablemente en tamaño y velocidad negativa.

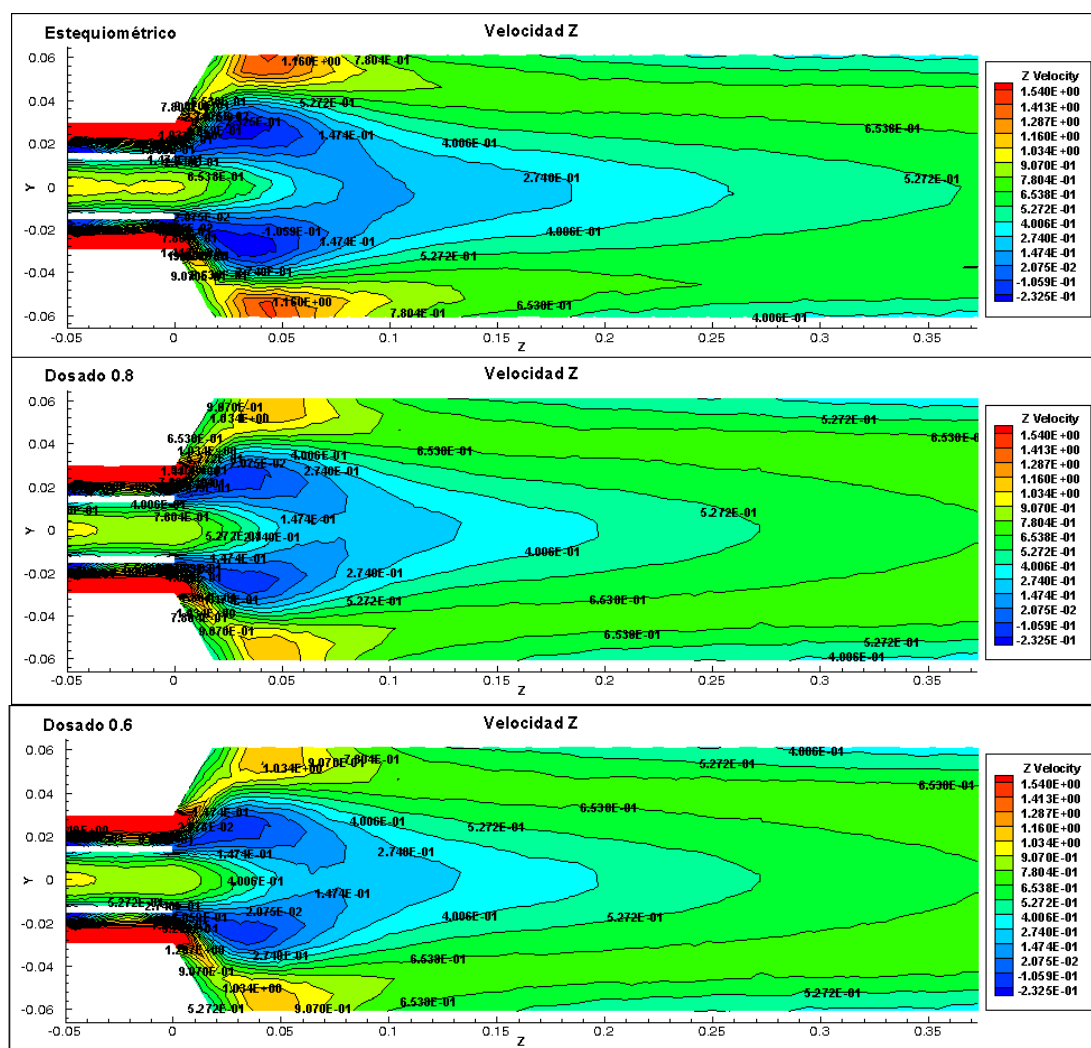


Figura 5. 14 Contorno de velocidades eje z.

En el contorno de temperaturas (*Figura 5. 15*), el caso estequiométrico es el que mejor resultados presenta. La temperatura de los gases quemados que se acumulan en las paredes es bastante superior en los casos en los que se disminuye el dosado, también hay que mencionar que la superficie en contacto con los gradientes más altos de temperaturas es mayor para estos casos.

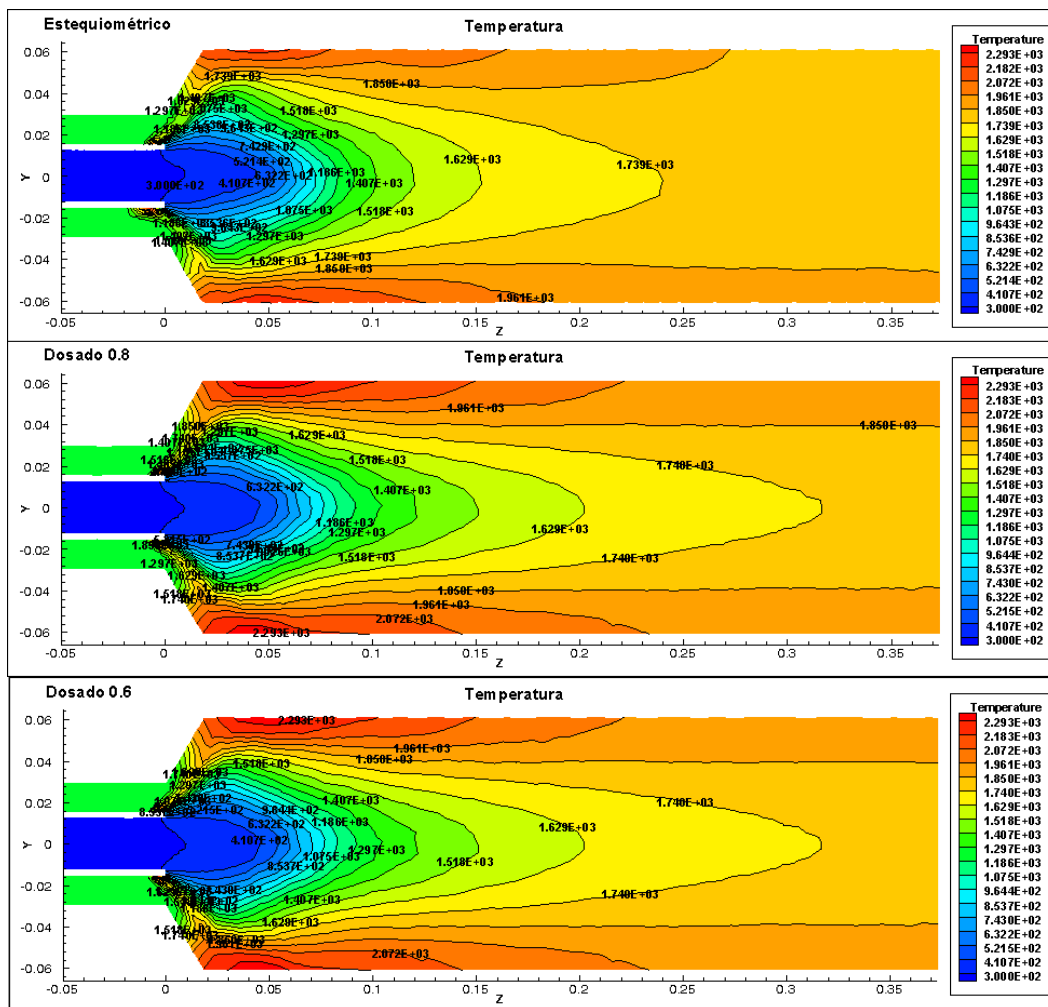


Figura 5. 15 Contorno temperaturas eje z.

Los gases salen en todos los casos a la misma temperatura (Figura 5. 16).

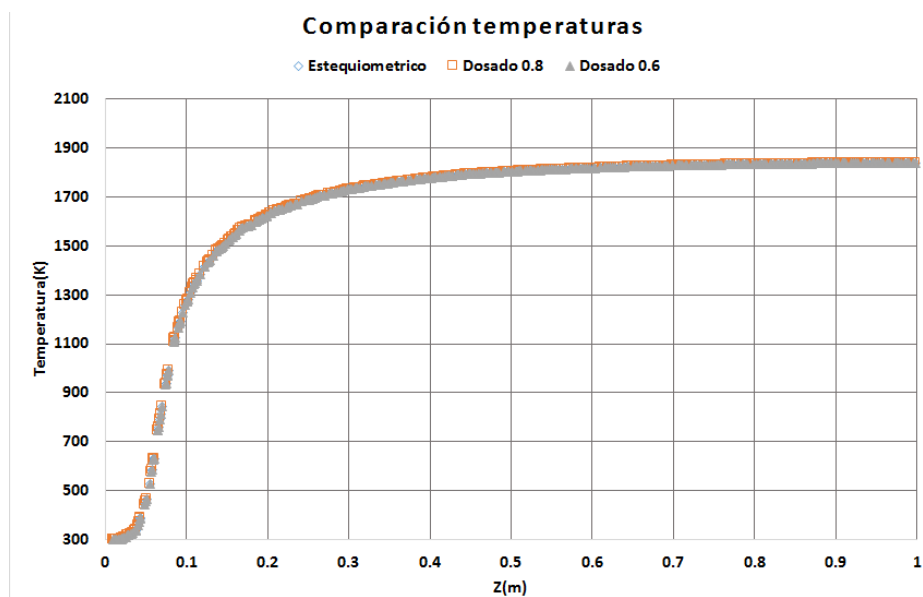


Figura 5. 16 Perfil de temperaturas a lo largo del eje z.

Al igual que en el caso sin difusor se consigue bajar el consumo de combustible y se consume más CH_4 (Figura 5. 17).

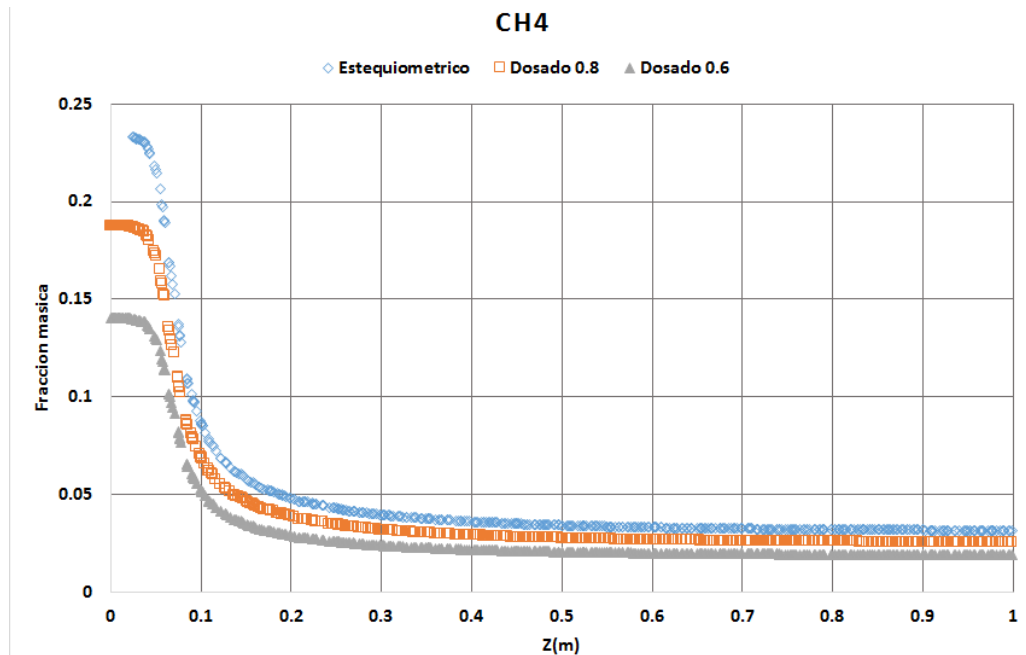


Figura 5. 17 Fracción másica CH_4 a lo largo del eje z.

Como conclusión se llega a que hay dos opciones válidas. La primera, si se busca reducir la cantidad de combustible consumido la opción más apropiada es el del dosado 0.6 ya que las temperaturas son iguales.

La segunda es si el material que disponemos para el quemador es lo suficientemente resistente para estar sometido a mayor carga térmica, si no se dispone de buenos materiales, el dosado adecuado es el estequiométrico, ya que las temperaturas de los gases en las paredes son menores y están en contacto con menos superficie.

Una vez concluido el análisis de los casos computacionales pasamos a la relación con el estudio que realizó Nazim Merlo.

Es los estudios de Merlo, se observa que al disminuir el dosado y aumentar la cantidad de aire y por consiguiente el oxígeno, el flujo reverso en ZRI a la salida de las toberas mejora la estabilización de la llama. El enriquecimiento de oxígeno disminuye las emisiones de CO, pero aumenta NO_x . (Merlo, 2013)

En vista de los resultados obtenidos, es decir, al variar el dosado lo único que varía es el CH_4 manteniéndose el resto de compuestos iguales que el caso estequiométrico se propondrá para futuros trabajos el estudio de la variación de los productos de la combustión variando los parámetros del PDF.

6 Capítulo

CONCLUSIONES

6.1 CONCLUSIONES

En este capítulo se agrupan las conclusiones de los anteriores capítulos además de dar una conclusión general del trabajo, a la vez se propondrán futuros trabajos resultado de la experiencia alcanzada.

Se ha analizado la mezcla y combustión en un quemador con flujo rotante con un número de Swirl muy elevado (superior a la unidad). Ello implica muchas dificultades asociadas a los elevados gradientes y complejos patrones de flujo.

El refinamiento de la malla no resultó satisfactorio debido a que los resultados obtenidos no distaban mucho de la malla original. Teniendo en cuenta que el tiempo de procesamiento aumento considerablemente, se descartó y se eligió la malla de 400.000 celdas para el modelo con difusor y la de 600.000 para el caso sin difusor, es decir, las mallas originales.

Para la validación de los datos se comprobó los resultados con Roback y Johnson (Roback, 1983) del modelo sin difusor y se llegó a que los resultados eran válidos siendo las diferencias debidas al efecto difusivo del software de cálculo. El modelo con difusor se validó con los resultados obtenidos del modelo sin difusor computacional, siendo también aceptables.

El modelo de combustión PDF empleado a lo largo del presente trabajo se definió para cada caso particular, esto es debido a que la tabla PDF ofrecida por Fluent 14.0 no se ajustaba a resultados realistas.

Los resultados obtenidos para otros modelos de combustión que no eran el PDF, es decir, el ED y EDC no han sido satisfactorios, por tanto en siguientes pruebas se siguió trabajando con el modelo PDF.

Para estudiar el efecto que tiene el difusor tanto en la mezcla como en la combustión se eligieron las mallas originales de ambas y el modelo PDF creado para el caso estequiométrico con las condiciones iniciales marcadas en el capítulo 2. Se verificó que el efecto del difusor es beneficioso para elevados números de swirl, entre 1.2 y 1.4. Esto es debido a que el tiempo de cálculo necesario para el modelo sin difusor es mayor, a parte del hecho de que el difusor consigue direccionar el flujo en la dirección axial, con esto se elimina la ZRE y la temperatura del flujo general es mayor. También está el

inconveniente de la elevada temperatura que se establece en las paredes del quemador sin difusor, algo que no sería rentable ya que los beneficios de no utilizar difusor no justificarían el gasto en materiales.

El aspecto que más interés ha supuesto en cuanto a resultados, ha sido el debido al aumentar la temperatura de inyección del combustible. Se comprobó que al aumentar la temperatura mejoraba el gradiente de temperaturas, consiguiendo que la mayor temperatura se localizase en el eje axial de la cámara sin afectar a las paredes. El incremento de los productos de combustión en comparación con los beneficios alcanzados supone una mejora razonable. Con estos motivos resumidos animan a seguir investigando con el aumento de la temperatura.

Finalmente los resultados obtenidos con la variación del dosado no han sido concluyentes ya que arrojan comportamientos prácticamente idénticos.

6.2 FUTUROS TRABAJOS

- En vista de los resultados obtenidos en la mezcla sin difusor en la que aparece el PVC y según varios autores ya citados, que mencionan las ventajas de tener este tipo de flujos helicoidales en la ZRI, se propondrá para futuros trabajos el estudio del PVC en situaciones sin difusor con combustión, no solamente mezcla, para ello será conveniente el análisis con varios números de swirl en transitorio y comprobar si los beneficios son evidentes.
- Otro trabajo podría ser la obtención de resultados coherentes del proceso de combustión con el modelo EDC para el mismo número de swirl que se ha empleado en este trabajo, es decir, 1.4 ya que es el de la malla con difusor.
- Sería interesante seguir aumentado el rango de temperaturas del combustible hasta 800K que está próximo a la temperatura de autoignición del metano para establecer la temperatura a la que los beneficios sean los mayores posibles. Se puede estudiar tanto para modelos con difusor como sin difusor, en este trabajo se ha comprobado que en el caso con difusor las mejoras han sido notables.
- Comprobar el efecto del dosado en la combustión cambiando las tablas PDF y utilizando otros modelos de combustión como el EDC para comprobar si el problema de los resultados obtenidos está en el modelo de combustión y no en los parámetros establecidos en el PDF. Esto para mallas con difusor.

7 Capítulo

BIBLIOGRAFÍA

7.1 Referencias

1. Fluent, A. (2009). *Theory Guide*.
2. Fransen, R. (2011). Application of RANS and LES to the prediction of complex flows in gas turbine components. *In Proceedings of 46th Symposium of Applied Aerodynamics - AAAF 2011*. Orléans.

Obtenido de:

<http://www.princeton.edu/cefr/Files/2013%20Lecture%20Notes/Poinsot/5-Codes-DNS-LES-RANS.pptx.pdf> (30/06/2015)

3. Huang, Y. (2009). Dynamics and stability of lean-premixed swirl stabilized. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(4):293 –364. Obtenido de https://hal.archives-ouvertes.fr/file/index/docid/920462/filename/MAIN_TEX_FILE.pdf (30/06/2015)

4. Huerta, F. J. (2012). *Combustión de combustibles gaseosos con captura de CO2 utilizando transportadores sólidos de oxígeno basados en níquel*. Universidad de Zaragoza, Escuela de Ingeniería y Arquitectura, Ingeniería Química y Tecnologías del Medio Ambiente, Área de Ingeniería Química. Obtenido de <https://zaguan.unizar.es/record/31444?ln=es#> (30/06/2015)

5. Magnussen, B. F. (2005). *THE EDDY DISSIPATION CONCEPT A BRIDGE BETWEEN SCIENCE AND TECHNOLOGY*. Norwegian University of Science and Technology Trondheim, Norway and Computational Industry Technologies AS, Lisboa.

Obtenido de: http://folk.ntnu.no/ivarse/edc/BFM_ECOMAS2005_Lisboa.pdf (30/06/2015)

6. Merlo, N. (2013). Combustion characteristics of methane–oxygen enhanced air turbulent non-premixed swirling flames.

Obtenido de:

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0894177713002732>

Experimental Thermal and Fluid Science 56 (2014) 53–60 (30/06/2015)

7. Novoselac, A. (2010). *Reynolds Averaged Navier Stokes equations*. University of Texas at Austin, Civil, Architectural, and Environmental Engineering, Austin, Texas.

Obtenido de:

http://www.ce.utexas.edu/prof/Novoselac/classes/ARE372/Notes/372_NO06_ReynoldsEq.ppt (30/06/2015)

8. Oh, J. (2009). Acoustic excitation effect on NO_x reduction and flame stability in a lifted non-premixed turbulent hydrogen jet with coaxial air. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319909011021>
International journal of hydrogen energy 34 (2009) 7851–7861 (30/06/2015)

9. Poinso, T. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion* (2 ed.) RT Edwards, Inc .

10. Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows* (1 ed.) Cambridge University Press.

11. Roback, R. (1983). *Mass and Momentum turbulent transport experiments with confined swirling coaxial jets*. Informe NASA. R83-915540-26

12. Ros, J. (2007). *Aerodinámica y Mecánica de Fluidos Computacional*. Universidad Pública de Navarra, Ingeniería Mecánica, Navarra.

Obtenido de:

http://www.imac.unavarra.es/Cursos/AyMFC/ros/Aerodinamica_MFC.pdf
(30/06/2015)

13. Saavedra, J. M. (2010). *Fluidodinámica Computacional*. Escuela Superior de Ingenieros Universidad de Sevilla, Grupo Termotecnia, Sevilla.

Obtenido de:

<http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/4882/fichero/An%20El%20lisis%20del%20sistema%20de%20ventilaci%20n%20de%20un%20secadero%20solar%20mediante%20t%20cnica%20fluidodin%20mica%20computacional%20252FCapitulo+5.+Fluidodin%20mica+Computacional.pdf>
(30/06/2015)

14. Solà, P. M. (1989). *Electromecanizado: electroerosión y mecanizado electroquímico*. Marcombo.

15. Syred, N. (2005). *A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems.*

Obtenido de:

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128505000353#bib27>

Progress in Energy and Combustion Science 32 (2006) 93–161. (30/06/2015)

16. Waganoff, N. P. (1963). *Hornos Industriales.* Librería Mitre.

17. Yang, V. (2003). *Bifurcation of flame structure in a lean-premixed swirl-stabilized combustor: transition from stable to unstable flame.* Combustion and Flame 136 (2004) 383–389

Obtenido de:

[http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218003002840.](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218003002840)

(30/06/2015)

8 Capítulo

ANEXOS

8.1 PUBLICACIONES

Este trabajo ha sido objeto de la siguiente publicación:

AUTORES: Teresa Parra, Victor Mendoza, Alvaro G. Escorial, Francisco Castro

TÍTULO: Numerical modeling of swirl-stabilized turbulent lean non-premixed flames

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Coautor

CONGRESO: 7th EUROPEAN COMBUSTION MEETING

ACTAS: Proceedings of the 7th European Combustion Meeting -2015 P4-82

ISBN: 978-963-12-1257-0

LUGAR CELEBRACIÓN: Budapest, Hungary

FECHA: March 30–April 2, 2015

8.2 RESUMEN TRABAJO FIN DE GRADO

Título: **ESTUDIO DE LA COMBUSTIÓN EN CFD CON VARIACIÓN DE LOS MODELOS DE COMBUSTIÓN, DOSADO Y TEMPERATURA**

Autor: **Gómez Escorial, Álvaro**

Directora: **Parra Santos, María Teresa**

Este trabajo se basa en el estudio computacional mediante la utilización del software Ansys Fluent, el cual simula el comportamiento del flujo a lo largo de una cámara de combustión cuando el flujo entrante posee rotación. El diseño de la cámara es el realizado por Roback y Johnson.

El trabajo se divide en: introducción, modelo físico y numérico, validación de los modelos computacionales, influencia del difusor y otros modelos de combustión, influencia de la temperatura y el dosado, conclusiones, referencias y anexos. A continuación se explican brevemente los apartados.

1. Introducción:

Se justifica el objeto de este estudio así como los motivos ambientales y económicos por los cuales deben seguir mejorando las maquinas térmicas.

La combustión de este tipo de quemadores está regida por el comportamiento del flujo debido a las recirculaciones que se producen por la interacción del propio flujo y por la geometría de dicho quemador. El esquema seguido es:

- Variación de la geometría de la cámara, es decir, el uso de un difusor y compararlo con los datos obtenidos del modelo sin difusor para las mismas condiciones de contorno.
- Búsqueda de un modelo de combustión apropiado, siendo las opciones elegidas PDF, ED y EDC.
- Optimización del rendimiento de la combustión variando la temperatura de inyección del combustible a la entrada de la cámara y variando el dosado.
- Análisis de las ventajas e inconvenientes de los distintos modelos físicos y numéricos estudiados en este proyecto y proponer trabajos futuros.

2. Modelo físico y numérico

El **modelo geométrico** utilizado en este estudio corresponde al quemador diseñado por Roback y Johnson (Roback, 1983). La elección de este tipo de quemador es debida a la información disponible y contrastada que hay acerca de este diseño. Se han empleado dos geometrías, una con difusor y otra sin difusor. El diseño consiste en dos tubos concéntricos por donde pasa el combustible y el oxidante, este último atraviesa una sección compuesta por alabes que originan el giro o *swirl*. Estos dos tubos finalizan en la cámara de combustión donde se mezclan.

El **modelo numérico** se basa en las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía cinética turbulenta, disipación de energía cinética turbulenta, energía y fracción másica de especies químicas formuladas en las ecuaciones de Navier-Stokes.

Con estas ecuaciones se consigue definir el modelo de turbulencia de este trabajo, RNG k-ε. Para el caso de la combustión se analizan distintos métodos de modelos PDF, ED y EDC. El primero se basa en una función de probabilidad β del que se obtienen las reacciones químicas. En el modelo ED las velocidades de reacción se asumen que están controladas por la turbulencia, siendo las reacciones de combustión de un solo paso. El EDC es una extensión del modelo de ED, que incluye mecanismos químicos detallados en los flujos turbulentos. Estos mecanismos químicos se basan en las tasas de Arrhenius, que son distintos para cada reacción, que ocurre en varios pasos y no en uno.

El combustible pasa por la tobera central y el oxidante por la anular, para las cuales se definen las condiciones de contorno:

	Tobera central	Tobera anular
Velocidad axial (m/s)	0.66	1.54
Intensidad turbulenta	7.5%	12%
Diámetro Hidráulico (m)	0.025	0.014
Temperatura (K)	300	1200
Fracción másica modelo estequiométrico	0.234 CH ₄ +0.766 Add	0.22 O ₂ +0.78 N ₂
Fracción másica modelo 0.8	0.187 CH ₄ +0.813 Add	0.22 O ₂ +0.78 N ₂
Fracción másica modelo 0.6	0.14 CH ₄ +0.86 Add	0.22 O ₂ +0.78 N ₂
Caudal (m3)	0.000323977	0.003047973
Gasto (m3/s)	0.000211448	0.000897674

3. Validación de los modelos computacionales

Para la **validación del modelo de turbulencia** se comprueba el modelo computacional sin difusor con los datos del difusor diseñado por Roback y Johnson. Para validar el modelo con difusor se compara con los resultados del modelo sin difusor computacional. Los datos se obtienen de planos perpendiculares al eje axial.

Los primeros milímetros del modelo sin difusor muestran concordancia con el modelo de Roback y Johnson a excepción de la aparición del PVC debido a que el flujo no gira de manera axilsimétrica, esto es a consecuencia del elevado número de *swirl*. Para los primeros milímetros del modelo con difusor se aprecia el aumento de la velocidad axial y una mayor velocidad de recirculación, debido al efecto centrante del difusor sobre el flujo. En el modelo sin difusor los datos muestran que a medida que el flujo se aleja de la salida de la tobera central no hay cambios, a excepción del PVC. El modelo con difusor tiene más velocidad axial. Algo que tienen en común los modelos computacionales, es que el flujo difusivo producido por Fluent en las toberas anulares produce una disparidad con los resultados de Roback y Johnson. Por tanto los modelos se pueden dar por válidos.

Para probar la validez del PDF que ofrece Fluent para el estudio se analizan los datos de la estructura química de la llama y se puede comprobar la aparición de productos de combustión antes de la combustión, algo que no es coherente con las condiciones de contorno establecidas. Por tanto para cada variación de dosado y temperatura se define una tabla específica.

Otro de los estudios consiste en determinar la influencia del número de celdas en los resultados de la combustión. Al refinar el modelo con difusor del modelo PDF se observa que los resultados se vuelven más difusivos. En vista de los resultados obtenidos el uso de la malla refinada carece de sentido ya que se busca el efecto contrario del logrado.

4. Influencia del difusor y otros modelos de combustión

Para determinar el modelo físico más adecuado se estudia la mezcla y la combustión tanto para el modelo con difusor y sin difusor.

En el caso de la mezcla se produce la aparición del mencionado PVC en el modelo sin difusor, además de una ZRE y una ZRI. La primera debida al cambio brusco de sección y la segunda a consecuencia de la recirculación en la zona del eje de la cámara. Para el modelo con difusor solo aparece la ZRI debido a que el difusor se encarga de evitar el

salto brusco de geometría. En el caso del modelo sin difusor se aprecia una fuerte pérdida de energía en forma de viscosidad turbulenta, es a consecuencia de que el flujo tiene que invertir energía en las ZRE y el PVC.

Una vez activada la combustión se aprecia el aumento de la temperatura que conlleva un aumento de la velocidad axial del flujo. Con ello se consigue que el flujo se vuelva más homogéneo en ambos casos, e incluso el PVC del modelo sin difusor desaparece. Las ZRE y las ZRI se siguen manteniendo como en la mezcla. Al comparar el contorno de temperaturas se comprueba que el flujo con mayor gradiente de temperatura es el del modelo sin difusor, este se sitúa en torno a las paredes, en cambio para el modelo con difusor las mayores temperaturas se encuentran a lo largo del eje de la cámara. Por ello se puede concluir que la energía que consume la ausencia del difusor, así como el contorno de temperaturas, hace que el modelo seleccionado para siguientes estudios sea el caso con difusor.

Para comprobar cómo influye el uso de distintos modelos de combustión en los resultados se optó por las alternativas del ED y el EDC, para ello se compara los resultados de ambos con los obtenidos de PDF.

Al comparar ED y PDF se aprecia que la ZRI es menor y las zonas de recirculación son mayores para el caso del modelo ED. La mayor diferencia al comparar ambos modelos de combustión aparece en el contorno de temperaturas, en el cual se aprecia la influencia de una sola ecuación para resolver la combustión del ED, que muestra poco detalle y realismo, algo que en el caso del PDF no ocurre ya que las velocidades de reacción son determinadas por las expresiones cinéticas de Arrhenius. Por tanto el ED es solo un modelo intermedio que se utiliza como método de convergencia de los resultados que posteriormente se utilizan para EDC.

En el caso del modelo con EDC no se obtienen los resultados esperados. A medida que ocurre la combustión la temperatura baja hasta la de mezcla, por tanto no es válido utilizar ninguno de estos modelos. Se opta por utilizar PDF en siguientes estudios.

5. Influencia de la temperatura y el dosado

Con los estudios presentados por Vigor Yang (Yang, 2003) se decide analizar cómo influye la temperatura de inyección del combustible en la combustión.

Se procede a la variación de dicha temperatura con un incremento de 50 grados en cada estudio partiendo de 300K a 400K para el modelo con difusor. Se comprueba que por cada 50 grados de incremento de temperatura de inyección del combustible los gases a la salida de la cámara lo hacen con un incremento de 100 grados. También hay que mencionar que al aumentar la temperatura general de la combustión las paredes de la cámara sufren más, por lo tanto hay que mejorar los materiales para evitar un desgaste excesivo a causa de la temperatura. Si este problema se evita se consiguen unas mejoras significativas en la combustión, con lo que aumentar la temperatura de inyección del combustible supone una mejora energética, algo que para las aplicaciones más habituales de estos quemadores tales como altos hornos siderúrgicos puede suponer un ahorro considerable de recursos.

Para el caso del dosado se analizan tanto el caso con difusor como sin él. Para este último la variación a dosados más pobres de combustibles no supone una diferencia apreciable. Para el modelo con difusor se aprecia que al disminuir el dosado los gases quemados tienden a dirigirse a las paredes de la cámara, lo que supone una fatiga térmica elevada. En consecuencia si no se tienen en cuenta los efectos del aumento de temperatura en las paredes es razonable utilizar el modelo de dosado relativo de 0.6 ya que supone un descenso de combustible para la misma temperatura de salida de los gases. Por el contrario, si no se dispone de los materiales adecuados para la cámara la opción es utilizar el modelo estequiométrico, ya que en las paredes de la cámara la temperatura de los gases no es tan elevada.

6. Conclusiones

- Los modelos computacionales son válidos al compararlos con los experimentales de Roback y Johnson.
- El modelo PDF a utilizar es específico de cada temperatura y dosado, no se puede utilizar el que proporciona Fluent para este estudio.
- El refinamiento de la malla no logra disminuir la difusividad sino que la incrementa, por tanto se descarta.
- El modelo más propicio para reducción de pérdidas de energía resulta el modelo con difusor.
- Para combustión, el modelo empleado en vista de los resultados obtenidos de analizar las tres alternativas es el modelo PDF.

- Al aumentar la temperatura de inyección del combustible se consigue un aumento significativo de la temperatura de salida de los gases.
- El dosado para el caso del modelo con difusor si se pretende disminuir el uso de metano es el más pobre, de 0.6. Si queremos un flujo donde la temperatura en las paredes sea menor se opta por el modelo estequiométrico.

7. Referencias y Anexos

Bibliografía utilizada y datos exportados del programa CFD Ansys Fluent de los distintos modelos físicos y numéricos utilizados en este proyecto.

8.3 SUMMARY

Fluent

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

Release: 14.5.7

Title:

Models

Model	Settings
-------	----------

Space	3D
-------	----

Time	Steady
------	--------

Viscous	RNG k-epsilon turbulence model
---------	--------------------------------

Wall Treatment	Standard Wall Functions
----------------	-------------------------

RNG Differential Viscosity Model	Disabled
----------------------------------	----------

RNG Swirl Dominated Flow Option	Enabled
---------------------------------	---------

Heat Transfer	Enabled
---------------	---------

Solidification and Melting	Disabled
----------------------------	----------

Radiation	None
-----------	------

Species	Non-Premixed Combustion ((ch4 n2 o2 add h2o co2 co h2 h oh o no n ho2 no2 nh3 nh hno n2o h2o2) species)
---------	---

Coupled Dispersed Phase	Disabled
-------------------------	----------

NOx Pollutants	Disabled
----------------	----------

SOx Pollutants	Disabled
----------------	----------

Soot	Disabled
------	----------

Mercury Pollutants	Disabled
--------------------	----------

Material Properties

Material: pdf-mixture (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species	names	(ch4 n2 o2 add h2o co2 co h2 h oh o no n ho2 no2 nh3 nh hno n2o h2o2)	
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (h2o2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------

Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 828.32602 1.6057414 -3.6298736e-05 -1.1307034e-06 6.0412174e-10) (1000-5000: 1117.8369 1.0598985 -0.0003604639 5.7415146e-08 -3.4994464e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	34.01468
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.3610648e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	232877.52
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (n2o . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 480.40208 1.7931447 -0.0018499269 1.183286e-06 -3.5926866e-10) (1000-5000: 891.44929 0.54286542 -0.00022621572 4.2514555e-08 -2.9759269e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.0128
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	82063973
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	219888.99
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (hno . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 746.45112 1.7719344 -0.0024932326 2.5301629e-06 -1.006155e-09) (1000-5000: 969.15901 0.86121294 -0.00033787505 6.0782401e-08 -4.1183886e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.01404
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	99584498
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	220606.84
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (nh . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1849.3872 0.6938521 -0.0019334945 2.3361624e-06 -8.6252916e-10) (1000-5000: 1528.4848 0.76159647 -0.00024652424 4.2598744e-08 -2.7784859e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	15.01464
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	3.5650779e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	181155.84
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (nh3 . pdf-mixture) (fluid)

Property Units Method Value(s)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1076.1694 4.9380521 -0.0071534573 7.0654354e-06 -2.6013907e-09) (1000-5000: 1201.9073 2.9580991 -0.00097883401 1.5310041e-07 -9.4629093e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	17.03052
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-45912304
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	192630.17
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (no2 . pdf-mixture) (fluid)

Property Units Method Value(s)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 482.64395 1.4166122 -0.0014573411 1.1135752e-06 -4.1930891e-10) (1000-5000: 846.30929 0.44502227 -0.00018836208 3.5727544e-08 -2.515179e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	46.0055
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	33097424
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	239923.26
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (ho2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 750.64746 1.2586592 -0.0009549455 5.9301684e-07 -2.037611e-10) (1000-5000: 1025.7778 0.53686973 -0.00013371124 1.5396699e-08 -7.1568424e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (n . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1485.8163 - 0.012940529 3.2176116e-05 -3.3523766e-08 1.2464974e-11) (1000-5000: 1454.4726 0.063286132 -4.4314043e-05 1.1157564e-08 -6.0902132e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	14.0067
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	4.7262532e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	153187.62
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (no . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 935.60009 0.34720924 -0.00091515347 1.4457942e-06 -6.7783064e-10) (1000-5000: 899.27215 0.35166341 -0.00013898446 2.5407013e-08 -1.7388453e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.0061
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	90296627
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	210650.69
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (o . pdf-mixture) (fluid)

Property Units Method Value(s)

Property Units Method Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1531.1577 - 0.851299 0.0012581269 -8.3294264e-07 2.0218614e-10) (1000-5000: 1321.021 -0.014317108 -1.6124204e-06 2.3650336e-09 -2.2699264e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	15.9994
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.49195e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	160943.58
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (oh . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------

Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1778.142 0.09048502 -0.00081942281 1.1670261e-06 -4.1218601e-10) (1000-5000: 1409.2737 0.49569933 -0.00011130917 1.0631324e-08 -2.5060852e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	17.00734
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	38985683
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	183602.61
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (h . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------

Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 20622.11 0 0 0 0) (1000-5000: 20622.11 0 0 0 0)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	1.00794
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.1797701e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	114603.82
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (h2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.855 3.4024177 -0.0033585231 -3.9080689e-07 1.7053957e-09) (1000-5000: 12337.891 2.8873611 -0.00023236285 -3.8074924e-08 6.5279369e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01588
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2448.5948
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130593.59
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (co . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 968.39484
 0.44879012 -0.0011522231 1.656891e-06 -7.3464085e-10) (1000-5000:
 897.9353 0.4282339 -0.0001671401 3.0234596e-08 -2.0513808e-12)

Molecular Weight kg/kgmol constant 28.0104
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -1.1053974e+08
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 197546.27
 Reference Temperature k constant 298.15
 Speed of Sound m/s none #f

Material: (co2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 429.93022
 1.8744798 -0.0019664917 1.2972557e-06 -3.9999695e-10) (1000-5000:
 841.37933 0.59324115 -0.00024151756 4.5227419e-08 -3.153141e-12)

Molecular Weight kg/kgmol constant 44.0098
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -3.9354283e+08
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 213734.59
 Reference Temperature k constant 298.15
 Speed of Sound m/s none #f

Material: (h2o . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 1563.0818
 1.6037598 -0.0029327939 3.2161116e-06 -1.1568305e-09) (1000-5000:
 1233.2377 1.4105281 -0.00040291547 5.5427906e-08 -2.949834e-12)

Molecular Weight kg/kgmol constant 18.01528
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -2.4184276e+08
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 188713.27
 Reference Temperature k constant 298.15
 Speed of Sound m/s none #f

Material: (add . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 403.5915
 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000:
 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)

Molecular Weight kg/kgmol constant 16.04276
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -74892973
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 186057.77
 Reference Temperature k constant 298.15
 Speed of Sound m/s none #f

Material: (o2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 834.82638
0.29295803 -0.0001495637 3.4138851e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000:
960.7523 0.15941258 -3.2708853e-05 4.6127636e-09 -2.9528327e-13)

Molecular Weight kg/kgmol constant 31.9988
Standard State Enthalpy j/kgmol constant -847.64045
Standard State Entropy j/kgmol-k constant 205041.62
Reference Temperature k constant 298.15
Speed of Sound m/s none #f

Material: (n2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 979.04296
0.41796388 -0.001176279 1.6743942e-06 -7.2562943e-10) (1000-5000:
868.62287 0.44162954 -0.00016872292 2.9967875e-08 -2.0043856e-12)

Molecular Weight kg/kgmol constant 28.0134
Standard State Enthalpy j/kgmol constant 1429.881
Standard State Entropy j/kgmol-k constant 191509.42
Reference Temperature k constant 298.15
Speed of Sound m/s none #f

Material: (ch4 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	pdf	#f

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 403.5915
 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000:
 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)

Molecular Weight kg/kgmol constant 16.04276
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -74892973
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 186057.77
 Reference Temperature k constant 298.15
 Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)

Density	kg/m3	constant	0.6679

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 403.58469
 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-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-air (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)

Mixture Species	names		((ch4 o2 co2 h2o p n2) () ())
Density	kg/m3	pdf	#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

Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)

Density kg/m3 constant 1.138

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 979.04297
0.41796389 -0.0011762792 1.6743943e-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: (water-vapor . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)

Density kg/m3 constant 0.5542

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 1563.0767
1.6037546 -0.0029327841 3.2161008e-06 -1.1568267e-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: (carbon-dioxide . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.7878
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.92889 1.8744735 -0.0019664851 1.2972514e-06 -3.9999562e-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	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.2999
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82648 0.29295802 -0.00014956371 3.413885e-07 -2.2783585e-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: (methane . methane-air) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.6679
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-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

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	2	fluid

Material: aluminum (solid)

Setup Conditions

zone1

Condition	Value

Material Name	pdf-mixture
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	Y-Component of Direction-1 Vector	0
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0	Z-Component of Direction-1 Vector	0
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis	0	X-Component of Direction-2 Vector	0
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis	0	Y-Component of Direction-2 Vector	1
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis	1	Z-Component of Direction-2 Vector	0
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function	none	X-Component of Cone Axis Vector	1
Deactivated Thread	no	Y-Component of Cone Axis Vector	0
Laminar zone?	no	Z-Component of Cone Axis Vector	0
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	yes	X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Embedded Subgrid-Scale Model	0	Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Momentum Spatial Discretization	0	Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Cwale	0.325	Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Cs	0.1	Relative Velocity Resistance Formulation?	yes
Porous zone?	no	Direction-1 Viscous Resistance (1/m ²)	0
Conical porous zone?	no	Direction-2 Viscous Resistance (1/m ²)	0
X-Component of Direction-1 Vector	1	Direction-3 Viscous Resistance (1/m ²)	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

Zones

name	id	type

outlet	3	pressure-outlet
outer_inlet	4	velocity-inlet
inner_inlet	5	velocity-inlet
wall-1	6	wall

Setup Conditions

outlet

Boundary Conditions

Condition	Value

Gauge Pressure (pascal)	0

Backflow Total Temperature (k)	2000	Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Direction Specification Method	1	Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Coordinate System	0	Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
X-Component of Flow Direction	1	Mean Mixture Fraction	0
Y-Component of Flow Direction	0	Mixture Fraction Variance	0
Z-Component of Flow Direction	0	is zone used in mixing-plane model?	no
X-Component of Axis Direction	1	Radial Equilibrium Pressure Distribution	no
Y-Component of Axis Direction	0	Specify Average Pressure Specification	no
Z-Component of Axis Direction	0	Specify targeted mass flow rate	no
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0	Targeted mass flow (kg/s)	1
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0	Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	5000000
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0	Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	1
Turbulent Specification Method	1		
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1	outer_inlet	
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1		
Backflow Turbulent Intensity (%)	9.9999994	Condition	Value

-----		Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Velocity Specification Method	2	Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Reference Frame	0	Angular velocity (rad/s)	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54	Temperature (k)	1200
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0	Turbulent Specification Method	1
Coordinate System	0	Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
X-Velocity (m/s)	0	Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Y-Velocity (m/s)	0	Turbulent Intensity (%)	7.4999996
Z-Velocity (m/s)	0	Turbulent Length Scale (m)	0.014
X-Component of Flow Direction	1	Hydraulic Diameter (m)	1
Y-Component of Flow Direction	0	Turbulent Viscosity Ratio	10
Z-Component of Flow Direction	0	Mean Mixture Fraction	0
X-Component of Axis Direction	1	Mixture Fraction Variance	0
Y-Component of Axis Direction	0	is zone used in mixing-plane model?	no
Z-Component of Axis Direction	0		
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0	inner_inlet	

Condition	Value	Z-Component of Axis Direction	0
-----		X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Velocity Specification Method	2	Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Reference Frame	0	Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Velocity Magnitude (m/s)	0.66000003	Angular velocity (rad/s)	0
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0	Temperature (k)	300
Coordinate System	0	Turbulent Specification Method	1
X-Velocity (m/s)	0	Turbulent Kinetic Energy (m ² /s ²)	1
Y-Velocity (m/s)	0	Turbulent Dissipation Rate (m ² /s ³)	1
Z-Velocity (m/s)	0	Turbulent Intensity (%)	12
X-Component of Flow Direction	1	Turbulent Length Scale (m)	0.025
Y-Component of Flow Direction	0	Hydraulic Diameter (m)	1
Z-Component of Flow Direction	0	Turbulent Viscosity Ratio	10
X-Component of Axis Direction	1	Mean Mixture Fraction	1
Y-Component of Axis Direction	0	Mixture Fraction Variance	0
		is zone used in mixing-plane model?	no

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

Solver Settings		Absolute Velocity Formulation	yes

Relaxation

Variable	Relaxation Factor

Pressure	0.3
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.7
Turbulent Kinetic Energy	0.8
Turbulent Dissipation Rate	0.8
Turbulent Viscosity	1
Energy	1
Temperature	1
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0.9

Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Reduction Tolerance

Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	0.7
Mean Mixture Fraction	Flexible	0.1	0.7
Mixture Fraction Variance	Flexible	0.1	0.7

Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value

Type	SIMPLE
Discretization Scheme	
Variable	Scheme

Pressure	Standard
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
Energy	Second Order Upwind
Mean Mixture Fraction	Second Order Upwind
Mixture Fraction Variance	Second Order Upwind

Solution Limits	
Quantity	Limit

Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	1
Maximum Temperature	5000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000