



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería Mecánica

**SIMULACIÓN CFD DEL PROCESO DE
COMBUSTIÓN EN UN QUEMADOR
CON PRERROTACIÓN**

Autor:

Martín Zamora, Javier

Tutor:

**Parra Santos, M^a Teresa
Dpto. Ingeniería Energética y
Fluidomecánica**

Valladolid, Julio 2015.

"When I meet God, I am going to ask him two questions:
Why relativity? And why turbulence?
I really believe he will have an answer for the first."

Werner Heisenberg

Este Trabajo de Fin de Grado va dedicado a mis padres y a mi hermano, por enseñarme que la base es el trabajo y la constancia.

A Teresa Parra por su incondicional apoyo durante estos meses de esfuerzo y por su preocupación constante por proveerme de los mejores consejos para mi futuro profesional.

Finalmente, agradecer al Consejo Social de la Universidad de Valladolid la confianza depositada en mi potencial a través de la Beca de Colaboración en tareas de investigación en el Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica que he disfrutado este curso.

Listado de términos

CFD (Computational Fluid Dynamics) – Dinámica de fluidos computacional

DNS (Direct Numerical Simulation) – Simulación numérica directa

LES (Large Eddy Simulation) – Simulación de grandes torbellinos

DES (Detached Eddy Simulation) – Simulación de torbellinos desacoplados

RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) - Ecuaciones de Navier Stokes promediadas de Reynolds

PDF (Probability Density Function) - Función Densidad de Probabilidad

ED (Eddy-Dissipation) - Disipación de torbellinos

EDC (Eddy-Dissipation Concept)

ORZ (Outer Recirculation Zone) – Zona de recirculación exterior

IRZ (Inner Recirculation Zone) – Zona de recirculación interior

Índice

1. Introducción.....	17
1.1. Presentación	19
1.2. Justificación	19
1.3. Objetivos	20
1.4. Estructura.....	20
2. Modelo físico y numérico.....	25
2.1. Introducción	27
2.2. Dominio computacional	27
2.3. Condiciones operativas.....	29
2.3.1. N° de Swirl	29
2.3.2. Hardware y software utilizado	29
2.3.3. Condiciones de contorno.....	30
2.4. Modelado de la turbulencia.....	31
2.4.1. Direct Numerical Simulation (DNS).....	31
2.4.2. Large Eddy Simulation (LES)	32
2.4.3. Detached Eddy Simulation (DES).....	32
2.4.4. Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)	32
2.4.5. Modelos de turbulencia basados en RANS.....	33
2.4.6. Validación del modelo de turbulencia	33
2.5. Modelos de combustión.....	35
2.5.1. Probability Density Function (PDF).....	35
2.5.2. Eddy Dissipation (ED).....	39
2.5.3. Eddy Dissipation Concept (EDC)	41
2.5.4. Frente de llama	42
2.6. Conclusiones.....	43
3. Patrón de flujo del caso reactivo.....	47
3.1. Introducción	49
3.2. Velocidad Axial.....	49
3.3. Temperaturas	50
3.4. Fracción másica de CH ₄	51

3.5.	Comparación con el caso no reactivo	53
3.6.	Análisis de sensibilidad de la malla	54
3.7.	Conclusiones.....	56
4.	Estudio del modelo de combustión	59
4.1.	Introducción	61
4.2.	Velocidad axial.....	61
4.3.	Temperatura	62
4.4.	Ubicación del frente de llama.....	65
4.5.	Conclusiones.....	66
5.	Estudio paramétrico.....	69
5.1.	Introducción	71
5.2.	Influencia de la geometría del difusor	71
5.2.1.	Velocidad axial.....	71
5.2.2.	Temperatura	72
5.2.3.	Fracción másica de CH ₄	73
5.3.	Influencia del dosado.....	74
5.4.	Conclusiones.....	75
6.	Estudio económico.....	77
6.1.	Introducción	79
6.2.	Costes directos	79
6.2.1.	Costes directos por personal.....	79
6.2.2.	Costes directos por material amortizable	81
6.2.3.	Costes directos por material no amortizable	83
6.2.4.	Costes directos totales	83
6.3.	Costes indirectos	83
6.4.	Coste total.....	84
7.	Conclusiones	87
7.1.	Introducción	89
7.2.	Conclusiones.....	89
7.3.	Agradecimientos.....	90
7.4.	Publicaciones.....	90
7.5.	Trabajos futuros.....	91

8. Bibliografía.....	93
Anexo I.....	97
A.1 Models.....	99
A.2 Material Properties.....	100
A.3 Cell Zone Conditions.....	114
A.4 Boundary Conditions.....	117
A.5 Solver Settings.....	122

Índice de figuras

Figura 1.1. Mix energético Español en el año 2014. Informe de Responsabilidad Corporativa 2014 - (Red Eléctrica Corporación, 2014).....	19
Figura 2.2. Modelo físico del quemador estudiado.....	27
Figura 2.3. Dominio computacional discretizado.	28
Figura 2.4. Esquema de las escalas turbulentas resueltas numéricamente y modeladas en función del modelo de turbulencia utilizado (SODJA, 2007). ...	31
Figura 2.5. Contorno de Velocidad Axial del caso no reactivo.....	33
Figura 2.6. Validación de los resultados obtenidos con los resultados experimentales de Roback&Palm&Ranga.	34
Figura 2.7. Interpretación de la función probabilidad de densidad (ANSYS, 2009).....	37
Figura 2.8. Esquema de funcionamiento del modelo PDF (ANSYS, 2009).	38
Figura 3.1. Contorno de velocidad axial con el modelo EDC.....	49
Figura 3.2 Perfiles de velocidad axial con el modelo EDC.....	50
Figura 3.3. Contorno de temperaturas con el modelo EDC.....	50
Figura 3.4. Contornos de temperatura aguas abajo del IDZ.....	51
Figura 3.5. Perfiles de temperatura con el modelo EDC.....	51
Figura 3.6. Contorno de fracción másica de CH ₄ con el modelo EDC.....	52
Figura 3.7. Perfiles de fracción másica de CH ₄ con el modelo EDC.....	52
Figura 3.8. Comparación entre el caso no reactivo y el modelo EDC.....	53
Figura 3.9. Comparación de los perfiles de temperatura con la malla original (400000 celdas) y refinada (800000 celdas).....	54
Figura 3.10. Detalle del gradiente de temperaturas a lo largo del eje Z para los modelos con malla original y refinada.....	55
Figura 4.1. Comparativa de contornos de velocidad axial de los modelos EDC, ED y PDF.....	62
Figura 4.2. Perfiles de velocidad axial de los modelos EDC, ED y PDF.....	62
Figura 4.3. Comparativa de contornos de temperatura de los modelos EDC, ED y PDF.....	63
Figura 4.4. Perfiles de temperatura de los modelos EDC, ED y PDF.....	64
Figura 4.5. Comparativa de contornos de temperatura al final de quemador para los modelos EDC, ED y PDF.....	65
Figura 4.6. Perfiles de varianza de la fracción de mezcla para el modelo PDF y del gradiente de temperatura para los modelos EDC y ED.....	66
Figura 5.1. Contornos de velocidad axial para los modelos con y sin difusor.....	71
Figura 5.2. Perfiles de velocidad axial para los modelos con y sin difusor.....	72
Figura 5.3. Contornos de temperatura para los modelos con y sin difusor.....	72
Figura 5.4. Perfiles de temperatura para los modelos con y sin difusor.....	73
Figura 5.5. Contornos de fracción másica de CH ₄ para los modelos con y sin difusor.....	73

Figura 5.6. Perfiles de fracción másica de CH₄ para los modelos con y sin difusor 74

Figura 5.7. Comparativa modelos PDF y EDC en función del dosado..... 74

Índice de Tablas

Tabla 2.1. Tamaño de malla.....	28
Tabla 2.2. Calidad de la malla.....	28
Tabla 2.3. Particiones de la malla	28
Tabla 2.4. Estadística colectiva de las particiones de malla	28
Tabla 2.5. Condiciones de contorno de entrada.....	30
Tabla 2.6 Modelos de turbulencia basados en RANS (Versteeg & Malalasekra, 2007)	33
Tabla 6.1. Costes directos analizados.....	79
Tabla 6.2. Costes indirectos analizados.....	79
Tabla 6.3. Costes directos por personal al año	80
Tabla 6.4. Clasificación de los días anuales	80
Tabla 6.5. Distribución temporal del trabajo realizado	81
Tabla 6.6. Costes directos por personal.....	81
Tabla 6.7. Inversión en inmovilizado amortizable	82
Tabla 6.8. Costes directos del material amortizable.....	82
Tabla 6.9. Costes directos del material no amortizable.....	83
Tabla 6.10. Resumen de costes directos totales	83
Tabla 6.11. Resumen de costes indirectos totales	84
Tabla 6.12. Costes totales del trabajo de investigación realizado.....	84

Resumen

Se estudia el proceso de combustión turbulenta en un quemador de flujo rotante, esto representa un gran desafío debido a la complejidad de las reacciones químicas que tienen lugar y su interacción con el comportamiento turbulento del flujo.

Se hace necesario un modelo que permita simular numéricamente el proceso de combustión turbulenta que tiene lugar. Esta necesidad será cubierta en el presente Trabajo de Fin de Grado.

El problema se aborda mediante el uso de CFD. Se analiza el patrón de flujo y la influencia de diversos parámetros. El modelo de turbulencia K-Epsilon se valida con datos experimentales de Roback, Palm & Ranga. Se compara la influencia del modelo de combustión comparando los modelos Eddy Dissipation, Probability Density Function y Eddy Dissipation Concept. Se estudia la influencia de la geometría del quemador comparando un modelo sin difusor y otro con difusor a 60°.

Palabras clave

CFD, Combustión, Swirl, RANS, Turbulencia

Abstract

The turbulent combustion process in a swirl burner is studied. This represents a great challenge due to the complexity of the chemistry of combustion and its interaction with the turbulent flow.

A numerical model is needed in order to simulate the behavior of the turbulent combustion that takes place in the aforementioned problem. This B.Sc. Thesis aims to fulfill this need.

CFD is used to solve this problem. Flow pattern is analysed. K-Epsilon is used to model turbulence and it's validated with experimental data from Roback, Palm & Ranga. In addition, the influence of the combustion model is studied comparing Eddy Dissipation, Probability Density Function and Eddy Dissipation Concept. Finally, the influence of the geometry in the burner is studied by comparing the simulations obtained in a model without nozzle and a 60° nozzle.

Keywords

CFD, Combustion, Swirl, RANS, Turbulence

1. Introducción

Índice

1.1. Presentación.....	19
1.2. Justificación.....	19
1.3. Objetivos.....	20
1.4. Estructura.....	20

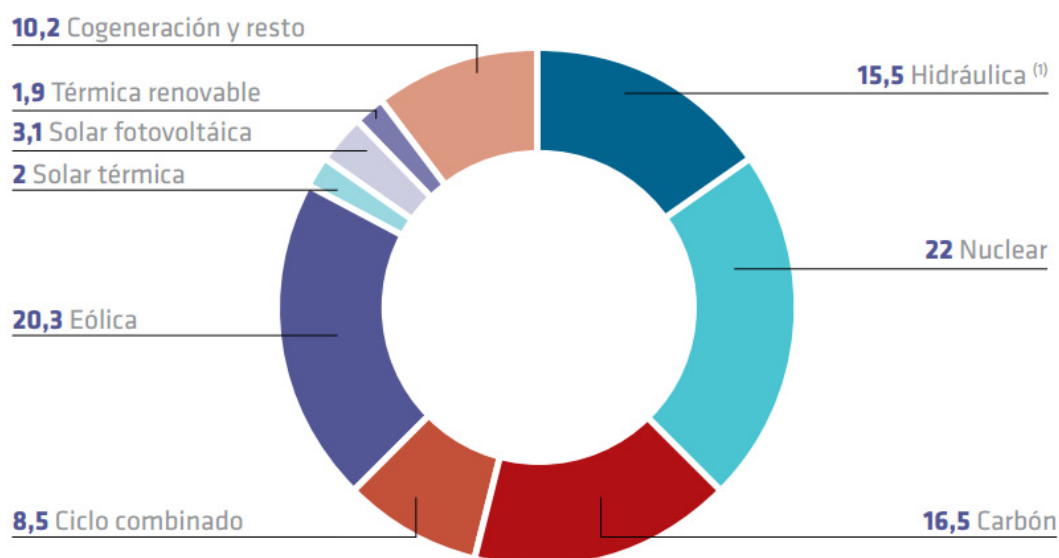
1.1. Presentación

En este Capítulo se presenta la justificación para la realización de este Trabajo de Fin de Grado. Además, se plantean los objetivos a cumplir en el presente escrito y cómo está estructurado su contenido.

1.2. Justificación

La energía eléctrica es la base de la civilización moderna. La generación de la energía eléctrica suele ir asociado a un proceso de combustión. La Figura 1.1 presenta el Mix energético español. Es decir, la distribución de las fuentes de energía utilizadas por el mercado energético español (Red Eléctrica Corporación, 2014).

Aunque las energías renovables juegan un papel importante en el mix energético español, se observa cómo el 25% de la energía eléctrica consumida en España tiene su origen a través de un proceso de combustión en un quemador (Carbón y ciclo combinado). Por tanto, la caracterización de este proceso es necesaria para la optimización del mismo, con el consiguiente ahorro energético y beneficio económico.



⁽¹⁾ No incluye la generación de bombeo.

Figura 1.1. Mix energético Español en el año 2014. Informe de Responsabilidad Corporativa 2014 - (Red Eléctrica Corporación, 2014)

Para el estudio del proceso de combustión en un quemador de flujo rotante, resulta necesaria la existencia de un modelo que simule numéricamente los fenómenos físicos. De esta manera, se puede predecir a priori el comportamiento aerodinámico que posee el flujo y utilizar esto en el diseño de quemadores más eficientes y más respetuosos con el medio ambiente.

Este Trabajo de Fin de Grado trata de cubrir esta necesidad, aportando un modelo numérico mediante CFD que simula el proceso de combustión en un quemador de flujo rotante.

1.3. Objetivos

Los principales objetivos de este Trabajo de Fin de Grado son:

- Modelado numérico de un proceso de combustión turbulenta en un quemador de flujo rotante con dos chorros axiales
- Selección del modelo de turbulencia más adecuado y validación experimental
- Elección del modelo de combustión más propicio para el modelado
- Descripción del patrón de flujo simulado
- Estudio de la influencia del modelo de combustión
- Determinación de la influencia de la geometría del difusor
- Determinación de la influencia del dosado de la mezcla utilizada

1.4. Estructura

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

- El presente Capítulo 1 sirve de introducción y justificación al trabajo desarrollado. En él se plantean los objetivos a alcanzar.
- El Capítulo 2 presenta el problema a estudiar y sienta las bases bibliográficas y teóricas que sostienen el trabajo desarrollado en los capítulos posteriores. Se presenta la teoría del modelado de turbulencia y combustión. Finalmente, se valida el modelo de turbulencia seleccionado en base a datos experimentales.
- El Capítulo 3 describe el patrón de flujo obtenido al resolver el caso reactivo. Se comparan los resultados obtenidos con el caso no reactivo y se realiza un análisis de sensibilidad de la malla.
- El Capítulo 4 estudia en profundidad la influencia del modelo de combustión comparando resultados simulados para los modelos *Eddy Dissipation Concept*, *Eddy Dissipation* y *Probability Density Function*.

- El Capítulo 5 analiza la influencia de la geometría del difusor y del dosado de la mezcla, comparando resultados obtenidos variando estos parámetros.
- El Capítulo 6 recoge el estudio económico realizado sobre la elaboración de este Trabajo de Fin de Grado.
- El Capítulo 7 resume las conclusiones extraídas del trabajo realizado así como propone líneas de futuro para la continuación de la línea de investigación seguida en este Trabajo de Fin de Grado.
- Finalmente se presentan las referencias bibliográficas utilizadas en la elaboración de este Trabajo de Fin de Grado.

2. Modelo físico y numérico

Índice

2.1. Introducción.....	27
2.2. Dominio computacional.....	27
2.3. Condiciones operativas	29
2.3.1. N° de Swirl	29
2.3.2. Hardware y software utilizado.....	29
2.3.3. Condiciones de contorno.....	30
2.4. Modelado de la turbulencia.....	31
2.4.1. Direct Numerical Simulation (DNS)	31
2.4.2. Large Eddy Simulation (LES)	32
2.4.3. Detached Eddy Simulation (DES)	32
2.4.4. Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)	32
2.4.5. Modelos de turbulencia basados en RANS.....	33
2.4.6. Validación del modelo de turbulencia	33
2.5. Modelos de combustión	35
2.5.1. Probability Density Function (PDF)	35
2.5.2. Eddy Dissipation (ED)	39
2.5.3. Eddy Dissipation Concept (EDC)	41
2.5.4. Frente de llama	42
2.6. Conclusiones	43

2.1. Introducción

En el presente capítulo se introducen las bases teóricas, presentando y comparando los modelos de turbulencia y combustión existentes así como razonando la elección del modelo utilizado en cada caso.

Adicionalmente, se define el problema a resolver en el presente Trabajo de Fin de Grado exponiendo su geometría, condiciones de contorno y parámetros seleccionados.

2.2. Dominio computacional

El modelo estudiado es una cámara de combustión de un quemador de flujo rotante con álabes a la entrada que proporcionan al fluido una prerrotación tal y como se muestra en la Figura 2.2.

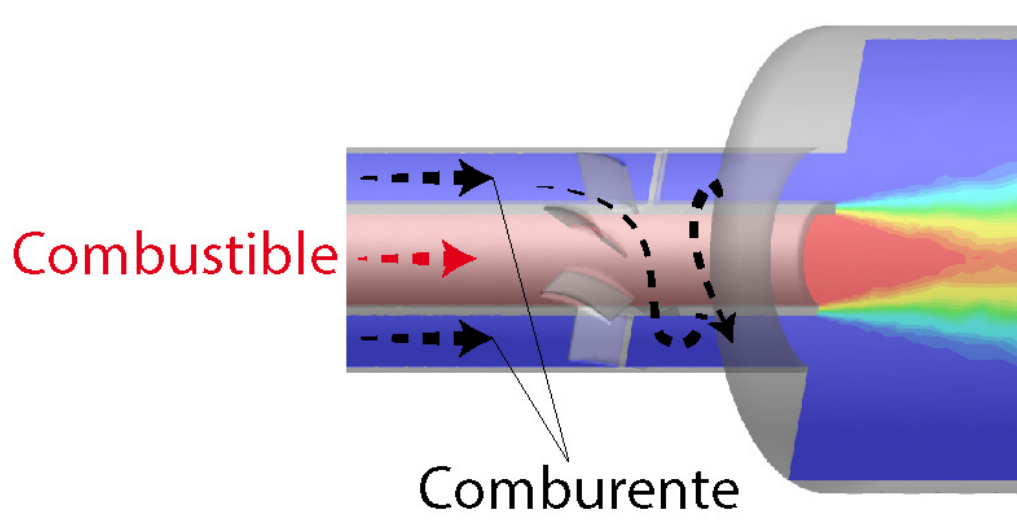


Figura 2.2. Modelo físico del quemador estudiado.

Como se aprecia en la figura, el quemador posee dos tubos coaxiales. Por el tubo interior discurre el combustible, CH₄, mientras que por el tubo exterior se trasiega el comburente, esto es, una mezcla de aire. Las composiciones de combustible y comburente se presentan en el apartado 2.3.3 Condiciones de contorno.

Debido al carácter computacional de este estudio, el primer paso una vez fijada la geometría del quemador es la discretización de la misma. Discretizar consiste en subdividir un dominio continuo como es la geometría del quemador, en un conjunto de elementos discretos que permita la aplicación de métodos numéricos de simulación.

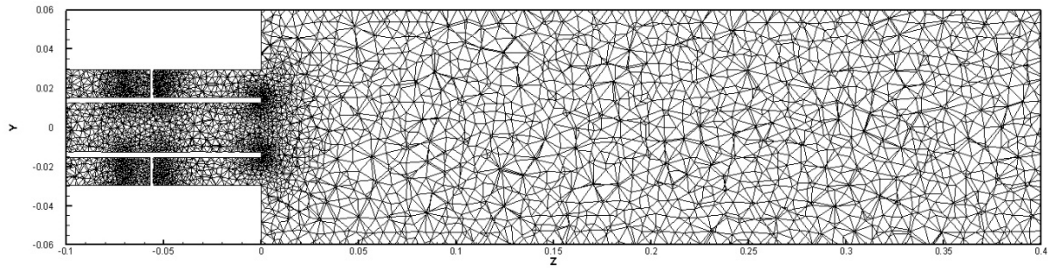


Figura 2.3. Dominio computacional discretizado.

Las características de la malla utilizada en este estudio se presentan en la Tabla 2.1 a Tabla 2.4 y en la Figura 2.3.

Tabla 2.1. Tamaño de malla

Mesh Size				
Level	Cells	Faces	Nodes	Partitions
0	436205	893925	83728	6
1 cell zone, 5 face zones.				

Tabla 2.2. Calidad de la malla

Mesh Quality
<i>Orthogonal Quality ranges from 0 to 1, where values close to 0 correspond to low quality.</i>
<i>Minimum Orthogonal Quality = 2.69178e-01</i>
<i>Maximum Aspect Ratio = 1.63567e+01</i>

Tabla 2.3. Particiones de la malla

P	Cells	I-Cells	Cell Ratio	Faces	I-Faces	Face Ratio	Neighbors	Load
0	71257	412	0.006	145951	412	0.003	1	1
1	69933	2263	0.032	143459	2500	0.017	3	1
2	75449	2136	0.028	155493	2157	0.014	3	1
3	75459	1645	0.022	155389	1710	0.011	3	1
4	74292	1188	0.016	154002	1341	0.009	2	1
5	69815	1574	0.023	144534	1686	0.012	2	1

Tabla 2.4. Estadística colectiva de las particiones de malla

Collective Partition Statistics	Minimum	Maximum	Total
Cell count	69815	75459	436205
Mean cell count deviation	-4.0%	3.8%	

<i>Partition boundary cell count</i>	412	2263	9218
<i>Partition boundary cell count ratio</i>	0.6%	3.2%	2.1%
<i>Face count</i>	143459	155493	893925
<i>Mean face count deviation</i>	-4.2%	3.8%	
<i>Partition boundary face count</i>	412	2500	4903
<i>Partition boundary face count ratio</i>	0.3%	1.7%	0.5%
<i>Partition neighbor count</i>	1	3	
<i>Partition Method</i>	Metis		
<i>Stored Partition Count</i>	6		

2.3. Condiciones operativas

A continuación se presentan los distintos parámetros utilizados en la configuración del modelo realizado. Se puede observar una lista detallada de la configuración utilizada en el Anexo I.

2.3.1. N° de Swirl

Uno de los parámetros adimensionales que permiten caracterizar el flujo a estudiar debido a su prerrotación es mediante el número de Swirl. Se define el Swirl mediante la (Ecuación 2.1):

$$S = \frac{\int r \cdot V_{\theta} \cdot \rho \cdot V_z \cdot dS}{R \int V_z^2 \cdot \rho \cdot dS} \quad (\text{Ecuación 2.1})$$

El número de Swirl es un indicador de la influencia de la velocidad tangencial respecto a la velocidad axial del flujo. Flujos con números de Swirl elevados producen el confinamiento del frente de llama debido a la rotación del flujo, mientras que flujos con Swirl bajo poseen mayor velocidad axial, lo que produce el lift-off o desprendimiento del frente de llama. Por motivos de estabilidad de la llama, interesa que ésta ocupe una posición lo más fija posible.

Se calcula el Swirl en la sección $Z = -25$ mm obteniendo un valor de 0.563. El método es hacer el promediado en masa de la cantidad de movimiento tangencial y el correspondiente axial. Esta labor se realiza cuando se ha alcanzado la convergencia completa.

2.3.2. Hardware y software utilizado

La simulación numérica se ha realizado mediante el software ANSYS FLUENT v14 en el clúster de computación del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales. El software resuelve mediante el método de volúmenes finitos las ecuaciones de conservación de Navier-Stokes para flujos estacionarios, incompresibles, turbulentos y reactivos.

El hardware utilizado son dos ordenadores con procesador de 8 núcleos Intel i7 4720 y 16GB de memoria RAM.

2.3.3. Condiciones de contorno

Para definir el problema que atañe este estudio se especifican en la Tabla 2.5 las condiciones de contorno correspondientes a una mezcla estequiométrica del combustible y comburente. Además, las paredes se consideran adiabáticas al imponer flujo de calor nulo.

Tabla 2.5. Condiciones de contorno de entrada

	Combustible	Comburente
<i>Inyección</i>	Tobera Central	Tobera Anular
<i>Diámetro (mm)</i>	0-25	31-59
<i>Composición</i>	23,4%CH ₄ 76,6%Add	22% O ₂ 78% N ₂
<i>Temperatura (K)</i>	3,0000E+02	1,2000E+03
<i>Densidad</i>	6,5267E-01	2,9452E-01
<i>Velocidad (m/s)</i>	6,6000E-01	1,5400E+00
<i>Caudal</i>	3,2398E-04	3,0480E-03
<i>Gasto</i>	2,1145E-04	8,9767E-04
<i>Intensidad Turbulenta (%)</i>	1,2000E+01	7,5000E+00
<i>Conductividad Térmica (W/m/K)</i>	Mixing-law	
<i>Viscosidad (kg/m/s)</i>	Mixing-law	
<i>Peso molecular (kg/kmol)</i>	1,6000E+01	2,8880E+01
<i>Gasto_esperado</i>	4,9505E-05	1,9749E-04
<i>Y_esperado</i>	0,234122755	

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

2.4. Modelado de la turbulencia

Uno de los principales problemas al que se enfrenta la mecánica de fluidos actual es el estudio de la turbulencia. La turbulencia se caracteriza por el movimiento caótico, tridimensional y altamente irregular de un fluido. El campo de velocidades en régimen turbulento es altamente variable tanto en el tiempo como el espacio, complicando el estudio de cualquier flujo turbulento. Lamentablemente, casi todas las aplicaciones reales en ingeniería están relacionadas con flujos turbulentos, por lo que, pese a las dificultades que entraña su estudio, no pueden ser obviados (Pope, 2000).

La combustión estudiada en el presente Trabajo de Fin de Grado corresponde a un proceso de combustión turbulenta, donde la turbulencia juega un papel crucial en la mezcla de los reactivos para permitir que la reacción de combustión tenga lugar.

El modelado de la turbulencia es por tanto, una complicación añadida en la simulación por CFD. Existen diversas maneras de simular la turbulencia en CFD que son presentadas a continuación y se esquematizan en la Figura 2.4.

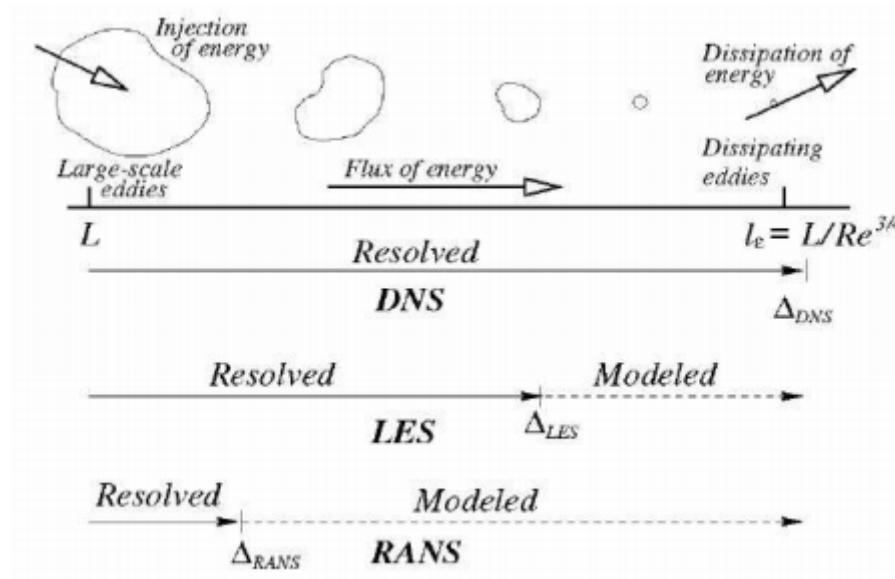


Figura 2.4. Esquema de las escalas turbulentas resueltas numéricamente y modeladas en función del modelo de turbulencia utilizado. (SODJA, 2007)

2.4.1. Direct Numerical Simulation (DNS)

La simulación numérica directa consiste en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes sin modelar la turbulencia. Este método proporciona resultados muy precisos al resolver todas las escalas turbulentas con el consiguiente coste computacional (Jacobs, 2008). Para el presente estudio se ha descartado este

modelo debido a que conlleva un coste computacional inaceptable a escala de Trabajo de Fin de Grado.

2.4.2. Large Eddy Simulation (LES)

El modelo LES resuelve directamente la macroescala turbulenta mientras que la microescala turbulenta se modela en virtud de la teoría de similitud propia (Kolmogorov, 1941).

Una de las consecuencias de esta teoría es el hecho de que la macroescala turbulenta del flujo depende de la geometría del problema, mientras que la microescala turbulenta es universal para todo tipo de flujo. Esta conclusión nos faculta a obtener resultados resolviendo solo la macroescala turbulenta y modelando la disipación de energía que ocurre en la microescala, reduciendo así el coste computacional comparado con una resolución mediante DNS (M. Germano, 1991).

Al igual que para DNS, el gasto computacional es demasiado elevado para ser un modelo viable en el presente estudio.

2.4.3. Detached Eddy Simulation (DES)

El modelo DES (Mockett, 2009) aúna las bondades de los modelos LES (2.4.2) y RANS (2.4.4). Este modelo realiza una simulación detallada de la macroescala turbulenta como en el caso LES para las regiones alejadas de los contornos del dominio. Las regiones cercanas al contorno se simulan mediante RANS.

La simulación mediante DES se fundamenta, como en el caso de LES, en la teoría de similitud propia de la microescala turbulenta, mencionada con anterioridad.

2.4.4. Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)

Como alternativa, el modelo de ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo de Reynolds modela los fenómenos turbulentos mediante el promediado de los efectos aleatorios debido a las escalas turbulentas. Gracias a esto, se reduce en gran medida el gasto computacional al no tener que resolver las escalas turbulentas. Sin embargo, el modelado de la turbulencia añade una nueva dificultad, el problema de cierre, es decir, el número de incógnitas es superior al de ecuaciones. Cada modelo de turbulencia basado en RANS lo resuelve añadiendo distintas ecuaciones de conservación. En el apartado 2.4.5 se presenta un listado de diversos modelos existentes.

2.4.5. Modelos de turbulencia basados en RANS

Se clasifican los distintos modelos de turbulencia basados en RANS según el número de ecuaciones adicionales que el modelo añade para resolver el problema de completitud. (Versteeg & Malalasekra, 2007).

La Tabla 2.6 recoge los distintos modelos de turbulencia en función del número de ecuaciones extra.

Tabla 2.6 Modelos de turbulencia basados en RANS (Versteeg & Malalasekra, 2007)

Número de ecuaciones extra	Nombre
Cero	Mixing length model
Una	Spalart-Allmaras model
Dos	k- ϵ model
	k- ω model
Cuatro	v2-f model
	Algebraic stress model
Siete	Reynolds stress model

2.4.6. Validación del modelo de turbulencia

Con el fin de aceptar el modelo de turbulencia k- ϵ Swirl Dominated propuesto por trabajos anteriores (Domínguez, 2013), se procede a comparar los resultados obtenidos con resultados no reactivos experimentales (Roback & Johnson, 1983). La validación experimental de las simulaciones numéricas resulta crucial en CFD debido a la complejidad de los fenómenos que se buscan modelar en el campo de la mecánica de fluidos (Anderson, 1995).

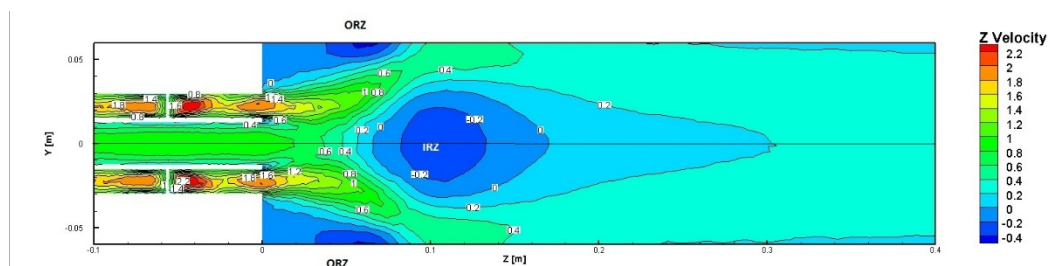


Figura 2.5. Contorno de Velocidad Axial del caso no reactivo

En la Figura 2.5 se muestran los contornos de velocidad axial para el caso no reactivo. Se identifica una zona de recirculación exterior (ORZ) y una zona de recirculación interior (IRZ), que se identifican por velocidades axiales negativas.

La ORZ es debida al desprendimiento de la capa límite del radio exterior de la tobera anular. La IRZ es debida a gradiente radial de presiones en presencia del chorro anular rotante.

Se valida el modelo de turbulencia comparando el perfil de velocidad axial a lo largo del eje Z tal y como se muestra en la Figura 2.6. (Roback & Johnson, 1983)

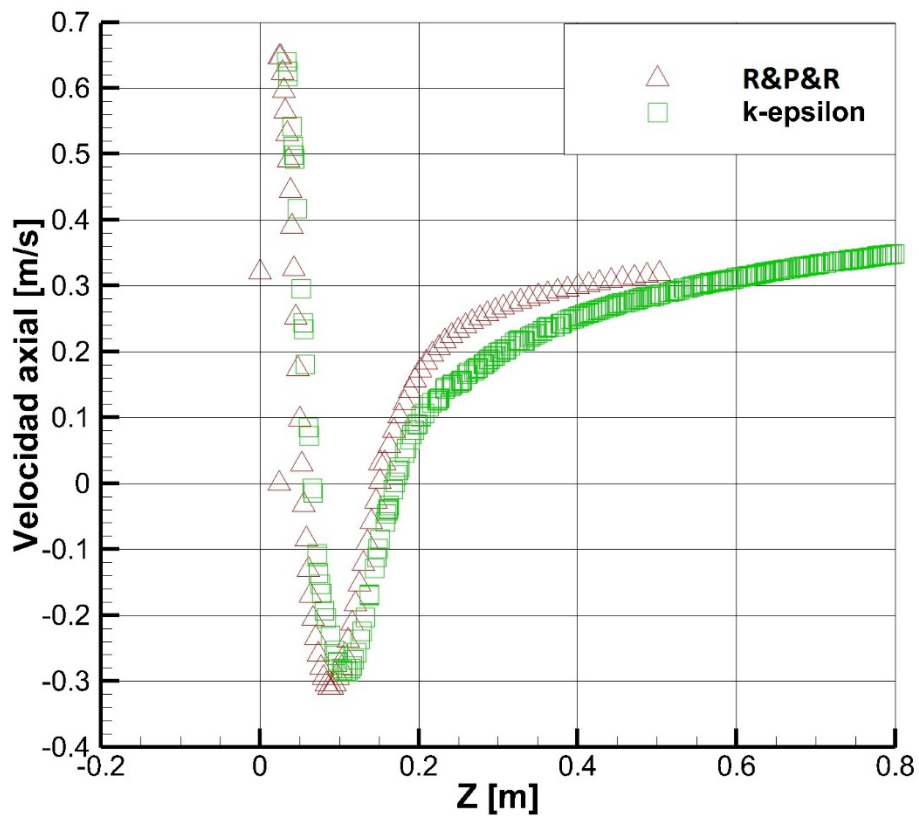


Figura 2.6. Validación de los resultados obtenidos con los resultados experimentales de Roback&Palm&Ranga.

La Figura 2.6 permite localizar dos puntos de remanso sobre el eje de la cámara de ensayo, evidenciando un tamaño similar de la IRZ. También se manifiesta el carácter disipativo del modelo numérico por capturar un menor gradiente de velocidad axial sobre el eje.

2.5. Modelos de combustión

La simulación numérica de un proceso de combustión como el que se aborda en el presente TFG presenta nuevos desafíos que hay que añadir al modelado de la turbulencia anteriormente descrito.

La combustión es una reacción química exotérmica que añade nuevas ecuaciones de conservación a resolver. Se distingue entre combustión premezclada, donde los compuestos han sido mezclados en la escala molecular previamente a la combustión, y combustión no premezclada. Este último caso es aquel en el que el combustible y comburente entran en la zona de reacción por corriente distintas, siendo por tanto un problema a resolver de mayor complejidad que en el caso pre-mezclado.

El problema de combustión estudiado corresponde a una combustión no premezclada en el que es necesario prestar especial atención a la interacción entre los fenómenos turbulentos y químicos. A continuación se detallan los distintos modelos utilizados para la simulación de la combustión.

2.5.1. Probability Density Function (PDF)

Bajo una serie de hipótesis simplificadoras, el estado termoquímico del fluido está relacionado con una magnitud escalar conservada denominada fracción de mezcla (*mixture fraction*), f . La fracción de mezcla se puede definir, en función de la fracción másica como:

$$f = \frac{Y_i - Y_{i,comburente}}{Y_{i,combustible} - Y_{i,comburente}} \quad (\text{Ecuación 2.2})$$

Si los coeficientes de difusión de todas las especies es el mismo, entonces la (Ecuación 2.2) es similar para todas las especies y la fracción másica es única, dando lugar a (Ecuación 2.3).

$$f = \frac{Y_{CH_4} - Y_{CH_4,comburente}}{Y_{CH_4,combustible} - Y_{CH_4,comburente}} \quad (\text{Ecuación 2.3})$$

La hipótesis de coeficientes de difusión iguales para todas las especies no es válida en flujo laminar, pero sí en flujo turbulento, como en el presente estudio, debido a que la convección turbulenta predomina en el transporte sobre la difusión molecular (ANSYS, 2009).

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

La interacción entre los fenómenos químicos y los turbulentos se modelan mediante una Función Densidad de Probabilidad, en el caso de ANSYS FLUENT, con una distribución Beta.

Se recurre a la ecuación de transporte de promediada en la densidad de Favre para la media de la fracción de mezcla. (Ecuación 2.4)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \bar{f}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) \quad (\text{Ecuación 2.4})$$

Además, se resuelve la ecuación de conservación de la varianza de la fracción de mezcla, f'^2 , con el fin de proporcionar completitud a la interacción de la turbulencia y la química molecular. (Ecuación 2.5)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \overline{f'^2}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla \bar{f})^2 - C_d \rho \frac{\epsilon}{k} \overline{f'^2} \quad (\text{Ecuación 2.5})$$

Donde f'^2 es la varianza de fracción másica.

Bajo la hipótesis de equilibrio químico, las propiedades termodinámicas escalares de densidad, temperatura y fracción másica están determinadas por la fracción de mezcla. Es precisamente en este punto donde radica el potencial del modelado mediante la fracción de mezcla.

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

La probabilidad de la fracción de mezcla, $p(f)$, puede ser entendida como la fracción del tiempo que el fluido pasa en el estado f . En la Figura 2.7 se muestra una representación gráfica de esta idea.

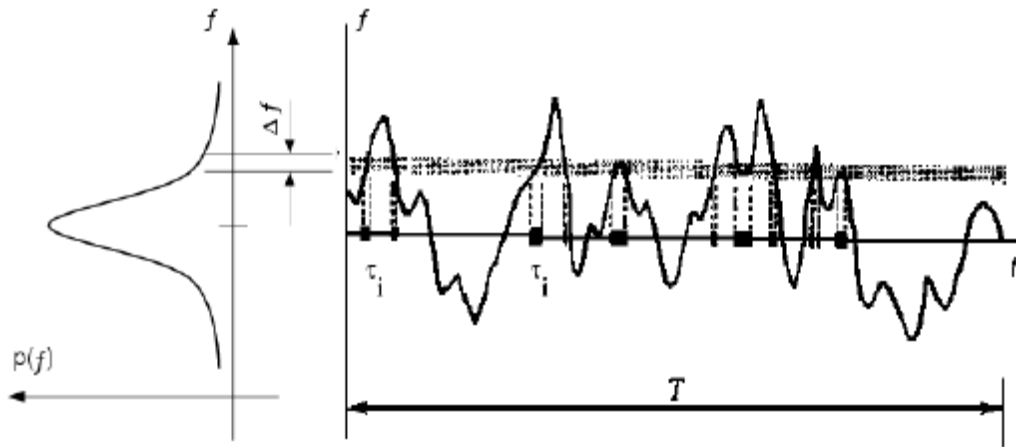


Figura 2.7. Interpretación de la función probabilidad de densidad (ANSYS, 2009)

En la Figura 2.7 se muestra una serie temporal de la fracción de mezcla en un punto del fluido determinado (derecha) y la función de densidad de probabilidad $p(f)$ (izquierda). El valor fluctuante de f , pasa una fracción del tiempo en la posición Δf , de tal manera que $p(f)$ toma valores tal que el área bajo la curva en el área Δf sea igual a la fracción del tiempo que f pasa en dicho rango. Esta idea se expone de manera matemática en la (Ecuación 2.6).

$$p(f) \Delta f = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_i \tau_i \quad (\text{Ecuación 2.6})$$

Donde T es la escala temporal y τ_i es la cantidad de tiempo que f pasa en la banda Δf . Por tanto, la forma de la distribución $p(f)$ depende de la naturaleza turbulenta de las fluctuaciones de f . En la práctica, la forma de $p(f)$ es desconocida, pero se modela como una distribución que aproxima la forma registrada experimentalmente. En este estudio, la PDF corresponde a una distribución doble Beta.

Partiendo de esta PDF, se pueden calcular los valores promediados de las variables que dependen de la fracción de mezcla, f . Se obtienen las expresiones para el cálculo de las propiedades termodinámicas escalares promediadas (Ecuación 2.7).

$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 p(f) \phi_i(f) df \quad (\text{Ecuación 2.7})$$

Suponiendo que la PDF sigue una distribución Beta, se obtiene el valor de $p(f)$ en función del promedio de la fracción másica \bar{f} y su varianza, f'^2 (Ecuación 2.8) - (Ecuación 2.10) (ANSYS, 2009).

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}df} \quad (\text{Ecuación 2.8})$$

$$\alpha = \bar{f} \left[\frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{f'^2} - 1 \right] \quad (\text{Ecuación 2.9})$$

$$\beta = (1-\bar{f}) \left[\frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{f'^2} - 1 \right] \quad (\text{Ecuación 2.10})$$

Para finalizar, se puede concluir que el modelo de combustión mediante PDF añade dos nuevas ecuaciones de conservación para el promedio de la fracción másica y su varianza. La interacción entre la turbulencia y las reacciones químicas se resuelve suponiendo una función probabilidad de densidad que depende de estas dos variables escalares \bar{f} y f'^2 . Los valores de las propiedades termodinámicas escalares de cada punto del fluido se miden o calculan y tabulan previamente a la simulación numérica y se recuperan durante la simulación.

La Figura 2.8 muestra este esquema del funcionamiento del modelo PDF.

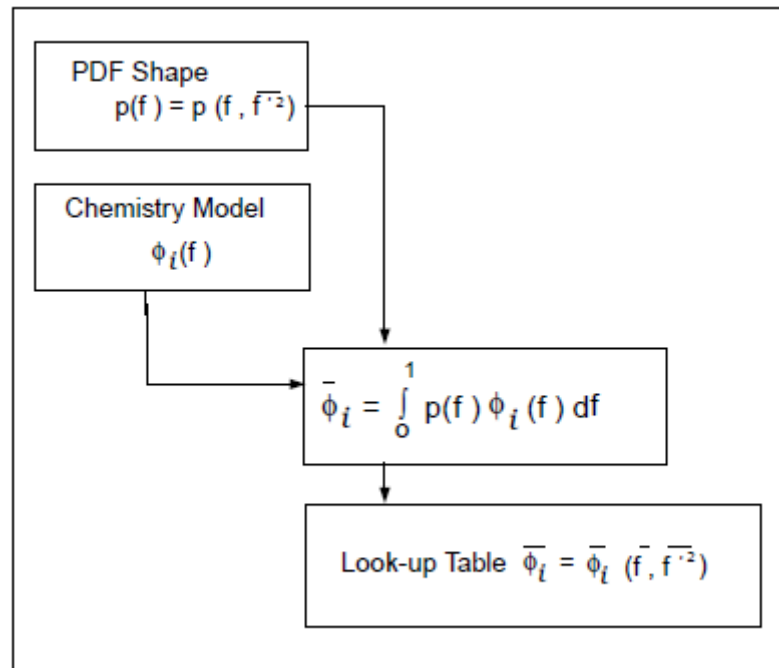


Figura 2.8. Esquema de funcionamiento del modelo PDF (ANSYS, 2009).

2.5.2. Eddy Dissipation (ED)

Mientras que en el modelo PDF se obtienen las propiedades termodinámicas en cada punto del fluido mediante valores tabulados en función de la fracción de mezcla y su varianza, también existe la posibilidad de modelar cada una de las reacciones químicas del problema.

En este caso, se resuelve una ecuación de conservación de la fracción másica, Y_i , por cada una de las i especies involucradas. Cada una de estas ecuaciones de Y_i toma la forma descrita en la (Ecuación 2.11):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (\text{Ecuación 2.11})$$

Donde J_i es el flujo difusivo de la especie i debido a los gradientes de concentración y temperatura. Para el caso de un flujo turbulento, ANSYS FLUENT modela esta componente según la (Ecuación 2.12):

$$\vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (\text{Ecuación 2.12})$$

Donde Sc_t es el número de Schmidt turbulento, que toma el valor por defecto de 0.7 para el aire. En un flujo turbulento la difusión turbulenta normalmente domina el transporte difusivo, pudiendo despreciar el resto de términos debidos al transporte difusivo laminar. Por tanto, el flujo difusivo toma la forma dada en la (Ecuación 2.13):

$$\vec{J}_i = -\left(\frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i \quad (\text{Ecuación 2.13})$$

El término R_i corresponde a la generación o destrucción de la especie i debido a las reacciones químicas. El modelado de este término particular supone la diferencia entre los dos modelos de combustión que se estudian a continuación, Eddy Dissipation (ED) y Eddy Dissipation Concept (EDC).

El modelo Eddy Dissipation (Magnussen & Hjertager, 1977) considera que la tasa de reacción de la especie i debido a la reacción r , $R_{i,r}$, es dado por el valor menor o limitante entre la tasa turbulenta y la escala química (Ecuación 2.14) y (Ecuación 2.15)(Ecuación 2.16).

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

$$R_{i,r} = \nu'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\epsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N \nu''_{j,r} M_{w,j}} \quad (\text{Ecuación 2.15})$$

Y_P es la fracción másica de cualquier producto de reacción, P

$Y_{\mathcal{R}}$ es la fracción másica de un reactivo particular, \mathcal{R}

A es una constante empírica con valor 4

B es una constante empírica con valor 0,5

La tasa de reacción está dominada por la escala temporal turbulenta, k/ϵ . Por tanto, existirá combustión siempre que exista turbulencia ($k/\epsilon > 0$) y no es necesaria una fuente de ignición para iniciar la combustión.

Se introduce el parámetro adimensional del número de Damköhler que informa de la escala temporal de una reacción (Poinso & Veynante, 2012). Se define según la (Ecuación 2.16):

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (\text{Ecuación 2.16})$$

τ_t es la escala temporal turbulenta

τ_c es la escala temporal química

Siempre que exista mezcla de reactivos, estos se quemarán de manera instantánea, por tanto el número de Damköhler de esta reacción es infinito.

En llamas no-premezcladas, también denominadas difusivas, la turbulencia mezcla “lentamente” los reactivos, combustible y comburente, en la zona de reacción donde las reacciones ocurren rápidamente. Se dice entonces que las reacciones de combustión están limitadas por la mezcla y gracias al método Eddy Dissipation se evita la computación de las tasas de reacción de Arrhenius que domina las reacciones químicas.

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\nu''_{j,r}} \right) \quad (\text{Ecuación 2.17})$$

$C_{j,r}$ es la concentración molar de la especie j en la reacción r (kgmol/m^3)

$\eta'_{j,r}$ es la tasa de reacción del reactivo j en la reacción r

$\eta''_{j,r}$ es la tasa de reacción del producto j en la reacción r

El modelo Eddy Dissipation presenta un coste computacional bajo debido a esta facultad de evitar el cálculo de las tasas de reacción de Arrhenius pero a cambio, se simplifica el fenómeno de la combustión.

2.5.3. Eddy Dissipation Concept (EDC)

El modelo Eddy Dissipation Concept (EDC) representa una extensión del modelo Eddy Dissipation mencionado anteriormente, en el que se incluyen mecanismos de reacción detallados junto al modelado del flujo turbulento. Este modelo asume que las reacciones tienen lugar en estructuras turbulentas pequeñas denominadas *fine scales*. Se puede modelar el tamaño de estas *fine scales* según la (Ecuación 2.18):

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \epsilon}{k^2} \right)^{1/4} \quad (\text{Ecuación 2.18})$$

Donde ϵ^* denota a las cantidades de las *fine scales*.

C_ξ es la fracción volumétrica de valor 2,1377 constante

ν es la viscosidad cinemática

Las reacciones que tienen lugar poseen una escala de tiempo del orden dado por la (Ecuación 2.19):

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (\text{Ecuación 2.19})$$

C_τ es una constante de la escala temporal de valor 0,4082

El término fuente R_i presentado en la ecuación de conservación de las especies, (Ecuación 2.11), toma la forma dada por la (Ecuación 2.20):

$$R_i = \frac{\rho(\xi^*)^2}{\tau^*[1 - (\xi^*)^3]} (Y_i^* - Y_i) \quad (\text{Ecuación 2.20})$$

Y_i^* es la fracción másica en la micro escala de la especie i tras la reacción a lo largo del tiempo τ^*

De esta forma, el modelo EDC permite incluir un modelado detallado de las reacciones químicas que tienen lugar junto a su interacción con los fenómenos turbulentos. Este mayor detalle en el modelado conlleva a su vez un mayor coste computacional

2.5.4. Frente de llama

En el estudio del patrón de flujo en un proceso de combustión cabe resaltar el concepto de frente de llama. El frente de llama corresponde a la región que separa la zona de los productos quemados completamente del fluido que todavía no ha reaccionado. Esta región corresponde a la zona donde tiene lugar la combustión. Se puede identificar el frente de llama mediante diversos criterios:

- Máximo gradiente de temperatura
- Región al 80% de la temperatura máxima alcanzada

- Región donde se alcanza un 10% de la fracción másica de combustible, en este estudio CH₄
- Máximo gradiente de fracción másica de combustible, CH₄

El frente de llama se estudia en el presente trabajo mediante el criterio de máximo gradiente de temperatura y máximo gradiente de fracción másica de CH₄. El concepto de frente de llama se aplica en el Capítulo 3, a la hora de describir el patrón de flujo del caso reactivo.

2.6. Conclusiones

En el presente capítulo se han presentado los fundamentos teóricos y operacionales del problema que es objeto de este Trabajo de Fin de Grado.

Se han presentado las condiciones operativas y de contorno que permitirían la reproducción de esta simulación en otra línea de investigación.

El problema que presenta el modelado de la turbulencia en CFD ha sido expuesto, así como los distintos modelos que existen para su resolución y modelado numérico. Cabe destacar los modelos LES, DES, DNS y RANS. Se ha seleccionado el modelo k-epsilon RNG Swirl Dominated al ser validado mediante datos experimentales.

Para el estudio de la combustión se han presentado tres modelos principales, PDF, ED y EDC. Se ha concluido que, en principio, el modelo EDC es el más apropiado para este Trabajo de Fin de Grado debido a que permite obtener resultados precisos con un coste computacional aceptable pero condicionado a los resultados que se presentan en el Capítulo 3 para mezclas estequiométricas.

Se utiliza un mecanismo de 5 reacciones $K_f = A T^\beta e^{-\frac{EA}{RqT}}$

	Reacción	A	β	Arrhenius
1	$\text{CH}_4 + \frac{3}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$	CH ₄ - 1	CH ₄ - 1,46	EA 1,72e8
		O ₂ - 1,5	O ₂ -0,5217	PEF
		CO - 1	CO - 0	1,659e15
		H ₂ O - 2	H ₂ O - 0	
2	$\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	CO - 1	CO - 1,69	EA 9,654e7
		O ₂ - 0,5	O ₂ - 1,57	PEF
		CO ₂ - 1	CO ₂ - 0	7,979e14
3	$\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2$	CO ₂ - 1	CO ₂ - 1	EA 5,177e8
		CO - 1	CO - 0	PEF
		O ₂ - 0,5	O ₂ - 0	2,2336e14
4	$\text{N}_2 + \text{O}_2 + \text{CO} \rightarrow 2 \text{NO} + \text{CO}$	N ₂ - 1	N ₂ - 0	EA 4,436e8
		O ₂ - 1	O ₂ - 4,011	PEF

		CO - 1	CO - 0,721	8,8308e23
		NO - 2	NO - 0	
		CO - 1	CO - 0	
5	$N_2 + O_2 \rightarrow 2 NO$	$N_2 - 1$	$N_2 - 1$	EA 5,727e8
		$O_2 - 1$	$O_2 - 0,5$	PEF
		NO - 2	NO - 0	9,2683e14

3. Patrón de flujo del caso reactivo

Índice

3.1. Introducción.....	49
3.2. Velocidad Axial	49
3.3. Temperaturas	50
3.4. Fracción másica de CH ₄	51
3.5. Análisis de sensibilidad de la malla.....	54
3.6. Conclusiones	56

3.1. Introducción

En este capítulo se presenta el campo fluido obtenido para el modelo computacional sin difusor y con una mezcla estequiométrica. Se presenta en primera instancia el modelo de combustión EDC y en los capítulos 4 y 5 se estudia la influencia de los distintos parámetros.

Se ha seleccionado el modelo de combustión EDC debido a la mayor complejidad del modelo. Tal y como se presenta en la sección 2.5.3, el modelo EDC simula tanto las reacciones químicas junto con la interacción turbulenta presente en el flujo.

3.2. Velocidad Axial

En la Figura 3.1 se muestra el contorno de velocidad axial para el modelo EDC sin difusor y mezcla estequiométrica:

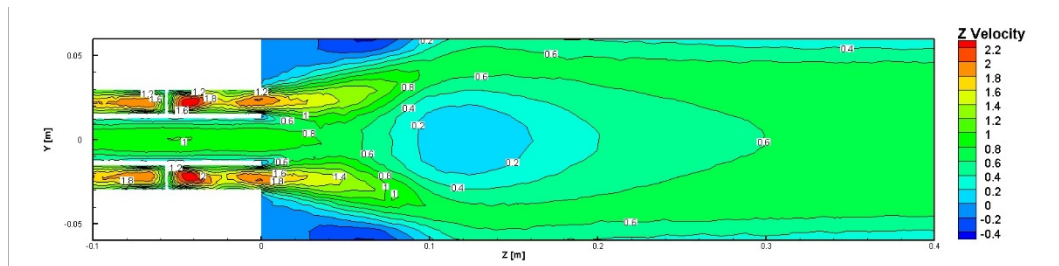


Figura 3.9. Contorno de velocidad axial con el modelo EDC

Se observa en el contorno de la velocidad axial cómo se produce una zona de recirculación exterior o *Outer Recirculation Zone (ORZ)*.

En el interior del flujo, la velocidad axial decrece pero no llega a ser negativa, produciéndose una zona de divergencia interior o *Inner Divergence Zone (IDZ)*. El flujo diverge al exterior de esta zona pero sin recirculación. Se puede apreciar en la Figura 3.9 y Figura 3.10 que el inicio de la IDZ se encuentra aproximadamente en $Z = 0,1$ m.

Es interesante apreciar las variaciones de la velocidad axial en la corona anular exterior de la tobera de entrada ($Z = -0,1$ m a $Z = 0$ m). Este aumento de la velocidad axial es debido a la interacción con los álabes que imponen la prerrotación al flujo.

En la Figura 3.10 se presentan los perfiles radiales de velocidad axial obtenidos en $Z = 5$ mm, $Z = 25$ mm y $Z = 100$ mm.

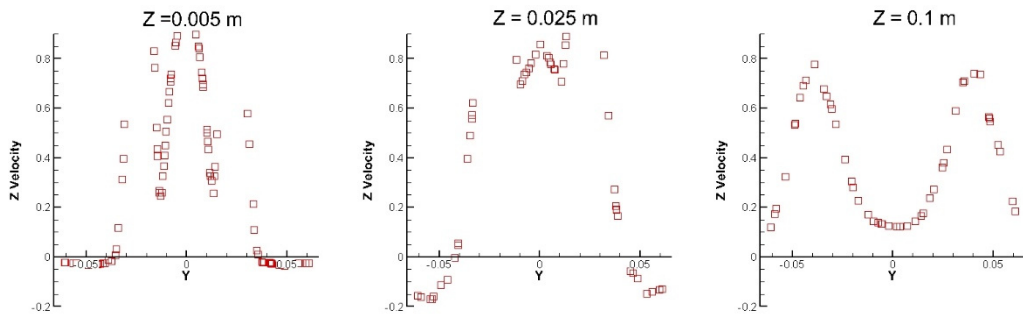


Figura 3.10 Perfiles de velocidad axial con el modelo EDC

En $Z = 5 \text{ mm}$ (izquierda), se pueden observar los dos chorros coaxiales entrando a distinta velocidad axial. En los perfiles en $Z = 5 \text{ y } Z = 25 \text{ mm}$ se puede apreciar la ORZ en los extremos del eje radial, al hacerse la velocidad axial negativa. En $Z = 100 \text{ mm}$ (derecha) se observa la IDZ en la zona central del quemador; la velocidad axial disminuye pero no llega a ser negativa, lo que produciría una zona de recirculación interna.

3.3. Temperaturas

A continuación se presenta el estudio de la temperatura del modelo EDC con mezcla estequiométrica. En la Figura 3.11 se presenta el contorno de temperaturas obtenido.

Se observa que el máximo gradiente de temperaturas se encuentra aguas arriba de la IDZ, entre $Z = 50 \text{ mm}$ y $Z = 100 \text{ mm}$. Determinar el máximo gradiente de temperaturas permite fijar la ubicación del frente de llama, que corresponde al lugar donde se está produciendo la combustión, tal y como se presenta en el apartado 2.5.4.

También se observa un incremento del gradiente de temperatura en la capa de cortadura entre los chorros anulares.

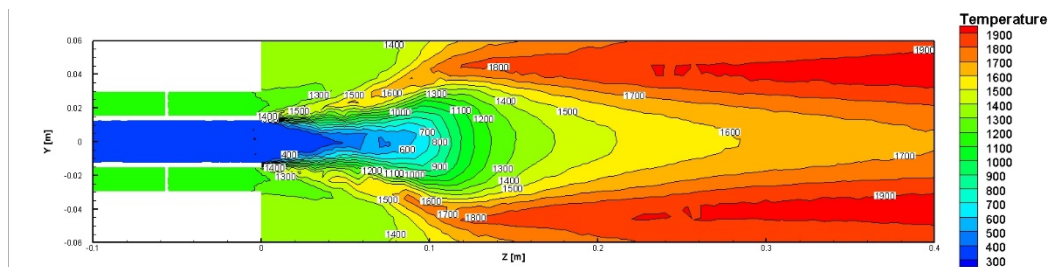


Figura 3.11. Contorno de temperaturas con el modelo EDC

A su vez, se puede apreciar como la temperatura máxima alcanzada es del orden de 1900 K . Aguas abajo de la IDZ el gradiente de temperatura es menor debido a la acción del frente de llama. El perfil de temperatura tiende a

3. Patrón de flujo del caso reactivo

homogeneizarse a medida que se avanza por la geometría del quemador debido a la mezcla de los gases de reacción (Figura 3.12).

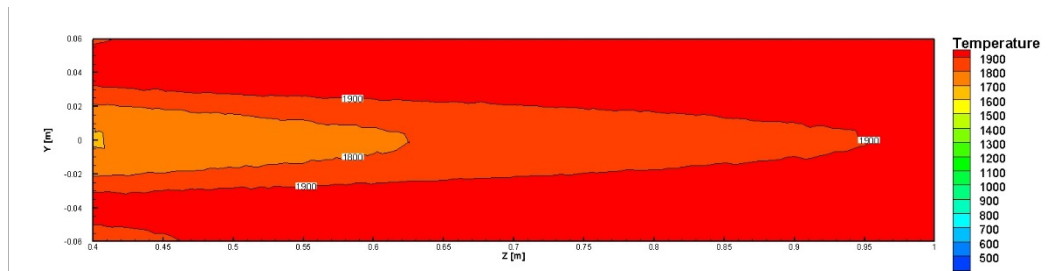


Figura 3.12. Contornos de temperatura aguas abajo del IDZ

La Figura 3.13 presenta una serie de perfiles radiales de temperatura entre las toberas de entrada y la zona de divergencia interior (IDZ).

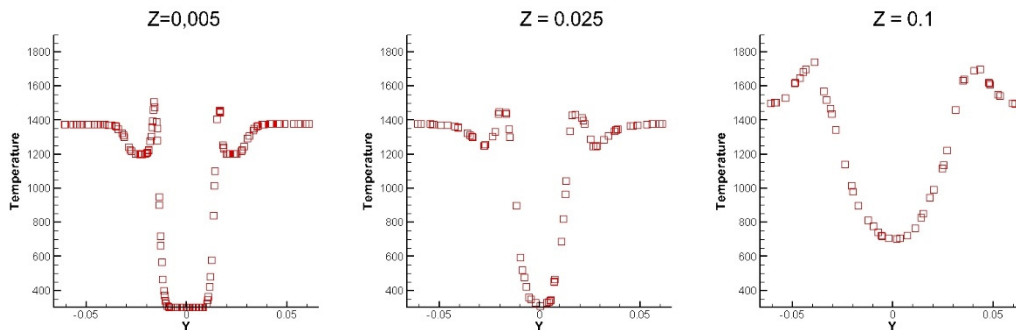


Figura 3.13. Perfiles de temperatura con el modelo EDC

En $Z = 0,005$ m se observa en la ORZ el proceso de mezcla de la corriente de comburente que entra por la tobera anular exterior a una temperatura de 1200 K junto con los gases de combustión, lo que provoca que la temperatura alcance 1400 K en los exteriores del flujo. Adicionalmente, se observa el flujo combustible que entra por la tobera interior a una temperatura de 300 K.

En $Z = 0,025$ m se muestra el proceso de mezcla de las dos corrientes, con unos gradientes menos pronunciados y una temperatura superior en el centro del eje radial.

En $Z = 0.1$ m se puede apreciar un aumento de la temperatura, debido al fenómeno de combustión tal y como se comentó con anterioridad. Es interesante resaltar que la IDZ provoca que los gases diverjan a los extremos laterales del quemador. Esto se aprecia en el gradiente de temperatura radial.

3.4. Fracción másica de CH_4

Finalmente, para definir el patrón de flujo obtenido, se estudia la fracción másica de CH_4 . En la Figura 3.14 se presentan los contornos de fracción másica de CH_4 en un plano longitudinal, lo que proporciona información de la evolución

del combustible en el interior del quemador, y por tanto, del desarrollo del proceso de combustión.

Se puede apreciar cómo el máximo gradiente de Y_{CH_4} corresponde al máximo gradiente de temperatura mostrado en el apartado 3.3. En base a estos datos se puede fijar la ubicación del frente de llama.

Debido a la presencia de una *IDZ*, se puede apreciar una zona de reacción radial muy localizada mientras que la zona de reacción longitudinal es más ancha.

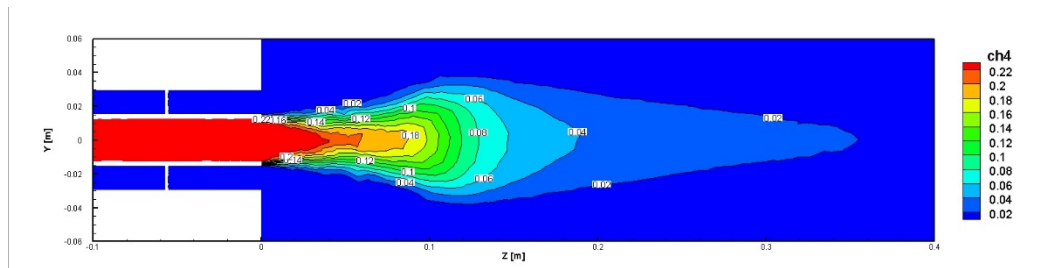


Figura 3.14. Contorno de fracción másica de CH₄ con el modelo EDC

La Figura 3.15 presenta los perfiles de fracción másica de CH₄ en función de la coordenada radial del quemador, en tres secciones del mismo.

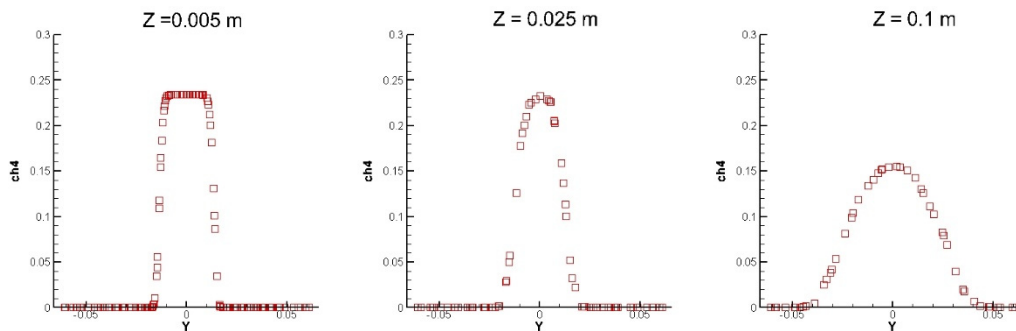


Figura 3.15. Perfiles de fracción másica de CH₄ con el modelo EDC

En $Z = 0.005$ m (izquierda), se observan dos zonas bien diferenciadas, correspondientes al flujo interior de combustible, con una fracción másica de CH₄ de 0.234 tal y como se presenta en las condiciones de contorno en el Capítulo 2, y otra zona con una ausencia total de CH₄.

En $Z = 0.025$ m (central), se aprecia el proceso de combustión al reducirse el gradiente de fracción másica de CH₄ a lo largo de la coordenada radial.

Finalmente, $Z = 0.1$ m (derecha), corresponde con el punto inicial de la *IDZ*. Se observa una reducción de la cantidad de CH₄ debido al proceso de combustión que se localiza aguas arriba de esta posición.

3.5. Comparación con el caso no reactivo

En la Figura XADSD se presenta una comparativa entre un modelo sin combustión (no reactivo) y el modelo EDC de combustión:

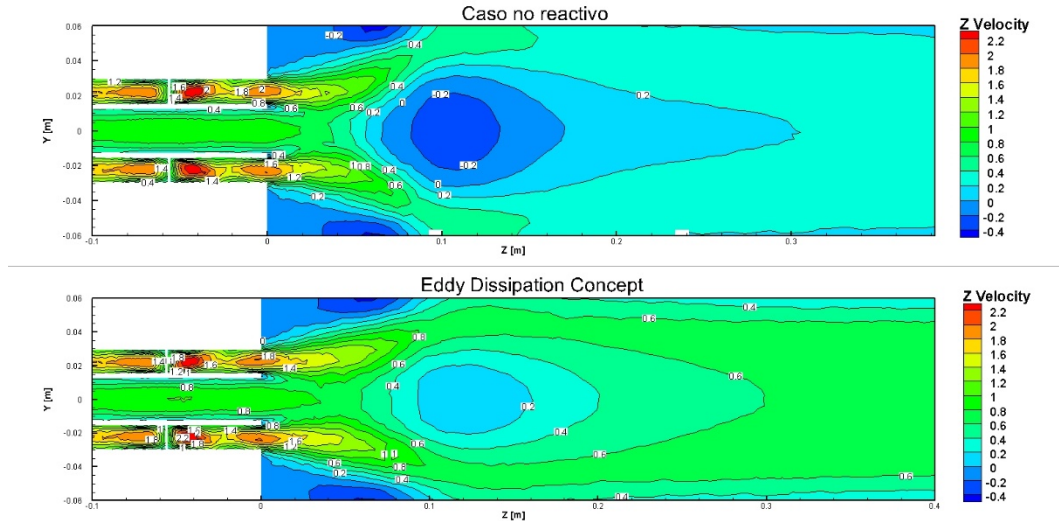


Figura 3.16. Comparación entre el caso no reactivo y el modelo EDC

Se observa como la zona de recirculación interior del caso no reactivo, en la que se obtienen velocidades axiales negativas, se ha convertido en una zona de divergencia interior, donde la velocidad axial disminuye pero no llega a producirse una recirculación.

Este fenómeno es debido a la combustión y se puede explicar al tener en cuenta que el gasto (Ecuación 3.21) se ha de mantener constante.

$$G = \rho \cdot V_z \cdot S = \frac{P}{R \cdot T} \cdot V_z \cdot S \quad (\text{Ecuación 3.21})$$

Donde P es la presión y R la constante universal de los gases

Al aumentar la temperatura, la densidad disminuye, como el gasto se ha de mantener constante, la velocidad axial aumenta.

3.6. Análisis de sensibilidad de la malla

En el capítulo 2 se han presentado las características de la malla utilizada. Sin embargo, no se ha presentado hasta el momento el estudio pormenorizado del tamaño de malla óptimo, que permita un resultado preciso con un coste computacional aceptable.

La zona del modelo más interesante para refinar la malla es el frente de llama, dado la gran cantidad de interacciones y fenómenos turbulentos y químicos que tienen lugar. Como se ha presentado en la sección 3.3, el frente de llama se encuentra aproximadamente entre $Z = 0.05$ m y $Z = 0.2$ m.

A la hora de estudiar la sensibilidad de la malla, el procedimiento consiste, en este caso, en el análisis del perfil de temperaturas a lo largo del eje Z. Se espera que una malla más refinada produzca gradientes de temperatura más elevados.

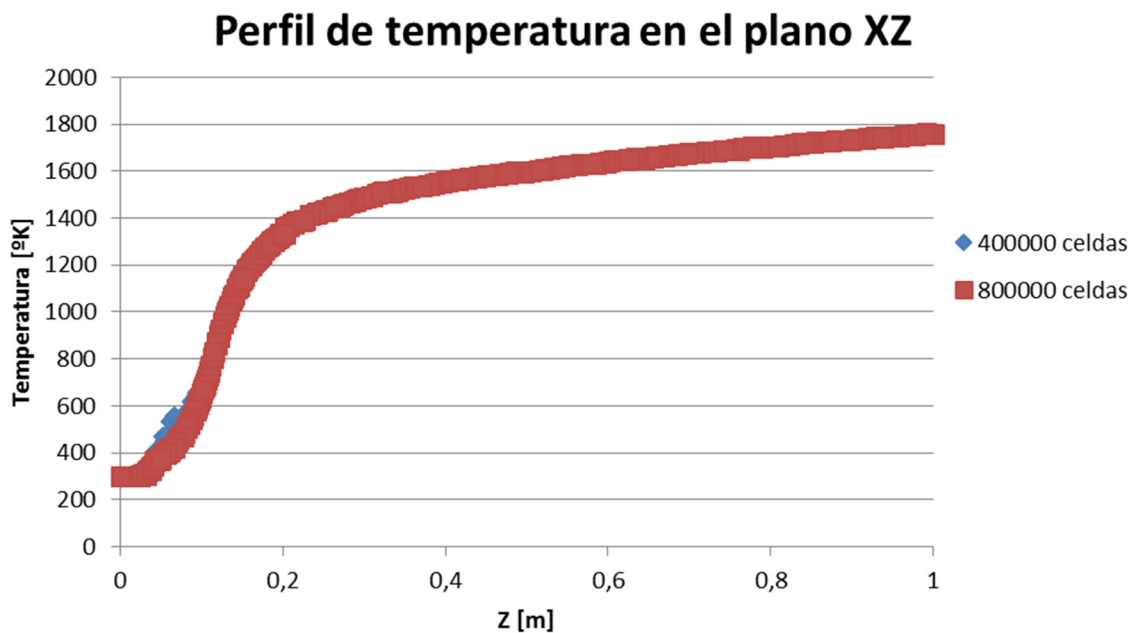


Figura 3.17. Comparación de los perfiles de temperatura con la malla original (400000 celdas) y refinada (800000 celdas)

En la Figura 3.17 se presenta la temperatura a lo largo del eje Z tanto para la malla original de 400000 celdas como para la malla refinada de 800000 celdas.

Como se aprecia, no existe una diferencia en orden de magnitud entre la forma del perfil de temperaturas de la malla original y de la malla refinada.

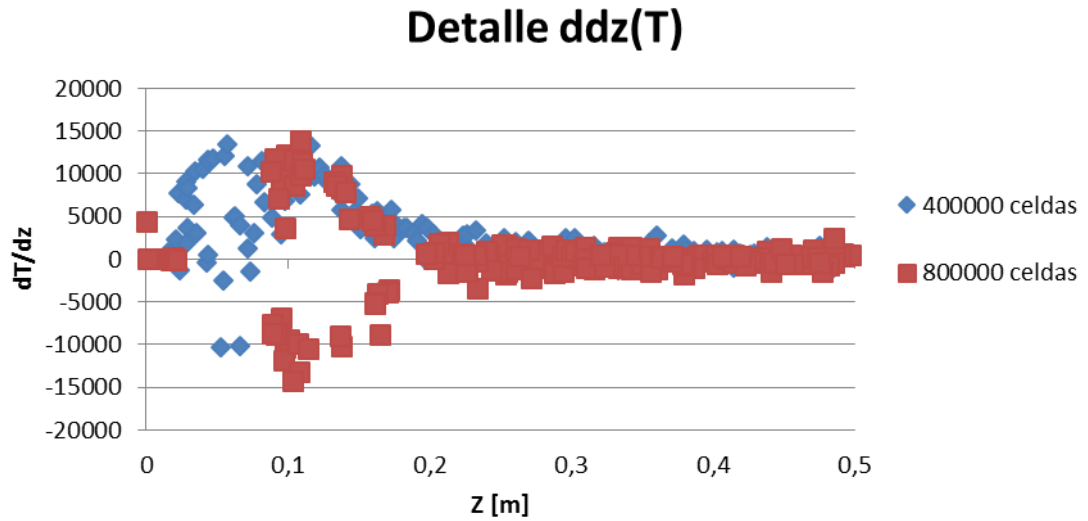


Figura 3.18. Detalle del gradiente de temperaturas a lo largo del eje Z para los modelos con malla original y refinada.

En la Figura 3.18 se observa el gradiente de temperatura a lo largo del eje Z. Es posible apreciar cierta discrepancia entre los valores de la malla original (azul) y la malla refinada (rojo). Sin embargo, con el fin de considerar que la malla refinada es más precisa, sería necesario obtener gradientes de mayor orden de magnitud, no de signo distinto.

En vista a lo presentado en las Figuras Figura 3.17 y Figura 3.18, se considera que la malla refinada no proporciona mejor precisión en los resultados frente a la malla original. Se descarta la malla de 800000 celdas debido a su mayor coste computacional respecto a la malla de 400000 celdas.

3.7. Conclusiones

En el presente Capítulo se describe el patrón de flujo de la simulación numérica realizada para el modelo de combustión EDC, con mezcla estequiométrica y sin difusor.

El patrón de flujo se presenta mediante el estudio del campo de velocidad axial, temperatura y fracción másica de CH₄.

Se observa que el flujo en el quemador viene determinado por la existencia de una zona de recirculación exterior y otra zona de divergencia interior. Estos fenómenos fijan la posición del frente de llama. Los máximos gradientes de temperatura y fracción másica de CH₄ ayudan a determinar la ubicación del frente de llama.

La malla utilizada es validada mediante un análisis de sensibilidad de malla. Se observa que el aumento de la resolución espacial en el modelo no produce mejor resolución en el perfil de temperaturas, por tanto, se concluye en mantener el modelo de 400000 celdas presentado en el Capítulo 2.

4. Estudio del modelo de combustión

Índice

4.1. Introducción.....	61
4.2. Velocidad axial.....	61
4.3. Temperatura	62
4.4. Ubicación del frente de llama	65
4.5. Conclusiones	66

4.1. Introducción

El objeto del presente capítulo es la comparación de los distintos modelos de combustión simulados. Se ha simulado el proceso de combustión turbulenta mediante tres aproximaciones: *Probability Density Function* (PDF), *Eddy Dissipation* (ED) y *Eddy Dissipation Concept* (EDC). En el Capítulo 2 se realiza una presentación detallada de la teoría subyacente de cada modelo de combustión.

El presente Trabajo de Fin de Grado presenta una propuesta nueva de estudio de combustión en flujos turbulentos al comparar estos tres modelos de combustión, mientras que trabajos previos se limitan al estudio por uno de los tres modelos mencionados anteriormente (Domínguez, 2013).

Todos los resultados que se presentan en este Capítulo hacen referencia al modelo estequiométrico sin difusor.

4.2. Velocidad axial

Se comienza estudiando el campo de velocidad axial. La Figura 4.19 presenta una comparativa de los contornos de velocidad axial para los tres modelos de combustión estudiados, Eddy Dissipation Concept (EDC), Eddy Dissipation (ED) y Probability Density Function (PDF).

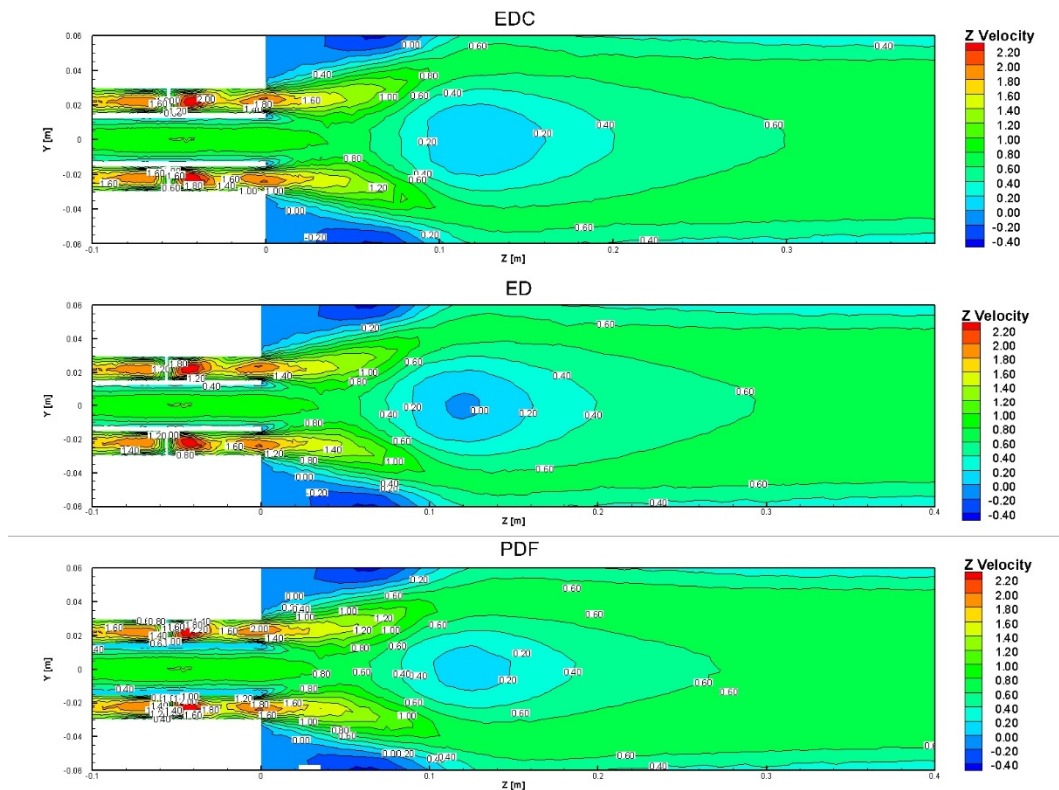


Figura 4.19. Comparativa de contornos de velocidad axial de los modelos EDC, ED y PDF

Los tres modelos capturan una zona de recirculación exterior entre $Z = 0$ y $Z = 0,1$ m. Se aprecia cómo tanto el modelo EDC (contorno superior) y el modelo PDF (contorno inferior) simulan una zona de divergencia interior, donde la velocidad axial disminuye pero no se produce recirculación, sin embargo, el modelo ED (contorno intermedio) presenta una pequeña zona de recirculación interior. Esto puede ser debido a la menor precisión del modelo ED debido a su hipótesis de reacción de combustión instantánea, controlada exclusivamente por la turbulencia.

El modelo EDC presenta una zona de divergencia interior más prolongada que el modelo PDF. Los resultados aguas abajo presentan buena concordancia entre los tres modelos de combustión estudiados.

A continuación, se presentan tres perfiles de velocidad axial en distintas secciones del quemador (Figura 4.20).

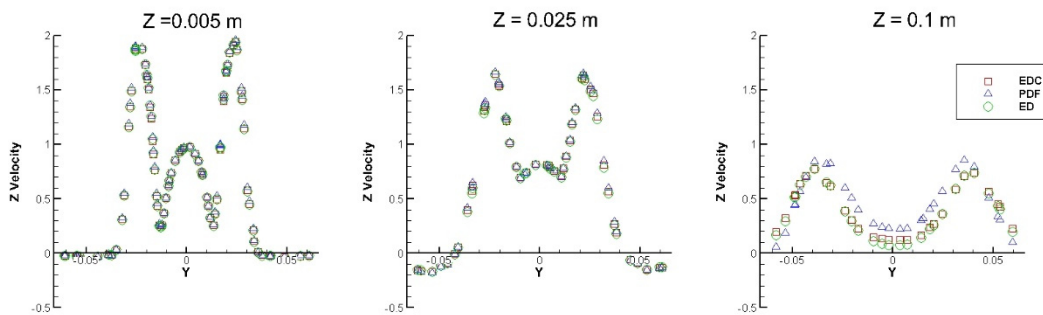


Figura 4.20. Perfiles de velocidad axial de los modelos EDC, ED y PDF

Se puede observar una buena similitud entre los tres modelos en los perfiles de las secciones $Z = 0,005$ y $Z = 0,025$ m. A medida que se considera la zona de divergencia o recirculación interior, que comienza aproximadamente en $Z = 0,1$ m para las tres simulaciones, se observa una ligera discrepancia entre los tres modelos de combustión.

El modelo PDF calcula una velocidad axial superior en el seno del flujo respecto a los modelos EDC y ED. Este hecho está correlado con los contornos presentados en la Figura 4.19, que presentaban una menor zona de divergencia interior para el modelo PDF.

4.3. Temperatura

A continuación, se analiza los resultados obtenidos para el campo de temperaturas. El estudio de la temperatura proporciona información al

4. Estudio del modelo de combustión

respecto del proceso de combustión y permite realizar una primera aproximación a la ubicación del frente de llama. Este último aspecto se profundiza posteriormente, en el apartado 4.4 Ubicación del frente de llama.

La Figura 4.21 presenta los contornos del campo de temperatura simulados mediante los tres modelos de combustión, EDC, ED y PDF.

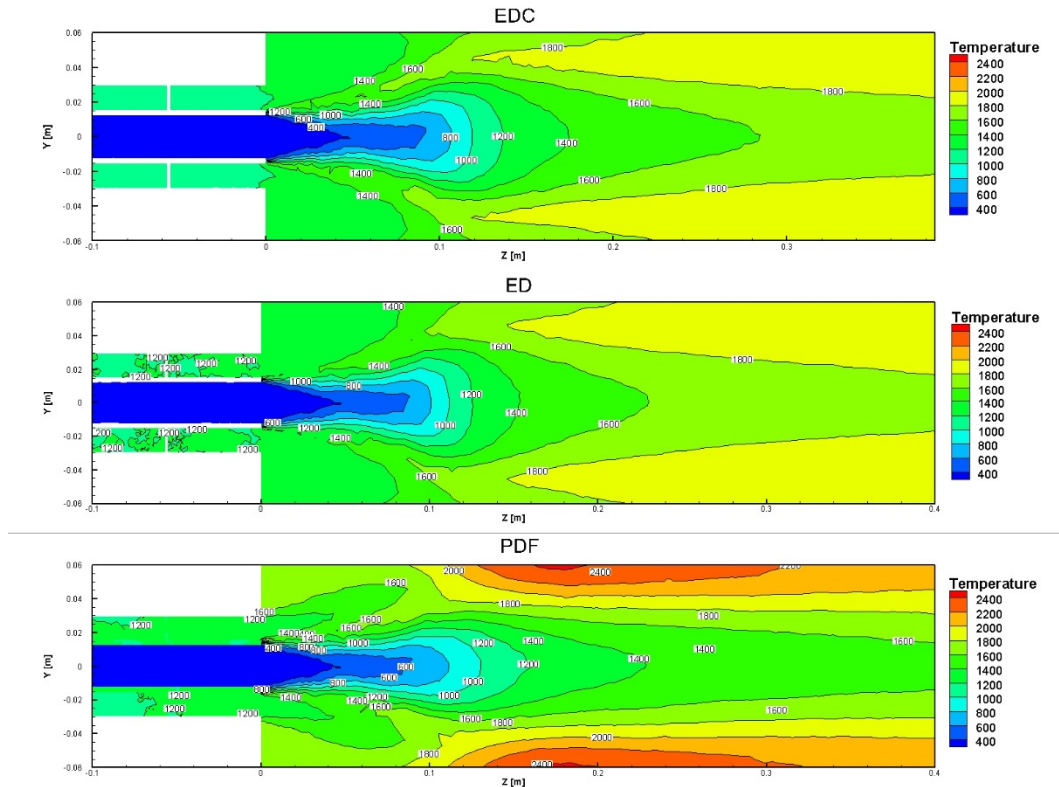


Figura 4.21. Comparativa de contornos de temperatura de los modelos EDC, ED y PDF

Se aprecia la concordancia entre los modelos EDC (contorno superior) y ED (contorno intermedio). El modelo PDF registra un campo de temperaturas diferente respecto a los otros modelos. En él, se observa cómo se alcanzan temperaturas de hasta 2400 K en las paredes del quemador, entre $Z = 0,1$ y $Z = 0,3$ m. Los gases de combustión salen despedidos a las paredes del quemador, concentrándose en una región reducida del espacio, lo que provoca este aumento de la temperatura.

Es interesante recordar que el campo de temperaturas registrado con el modelo PDF corresponde a una situación no deseable. Las temperaturas tan elevadas en contacto con las paredes del quemador, producen un aumento de las pérdidas de energía a través de las paredes y representan un riesgo para la integridad del quemador a largo plazo.

Este comportamiento simulado mediante el modelo PDF, junto con los contornos del campo de velocidad axial presentados en la Figura 4.19, indican

que la zona de divergencia interior menor y mayor distancia de la tobera anular, produce un frente de llama más desplazado en el quemador.

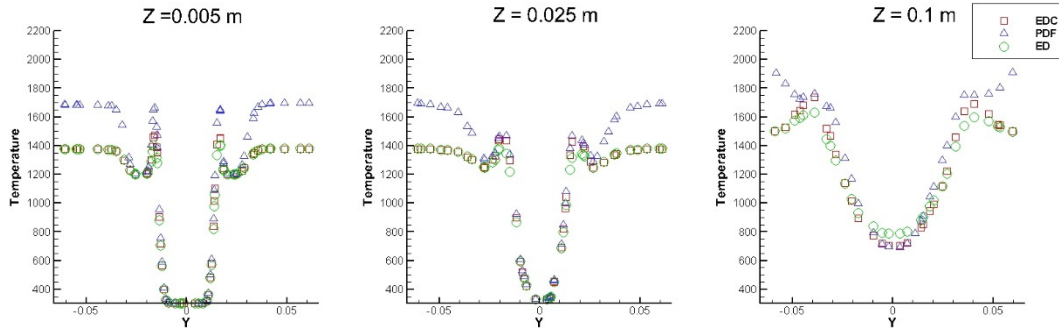


Figura 4.22. Perfiles de temperatura de los modelos EDC, ED y PDF

La Figura 4.22 presenta perfiles de temperatura para los tres modelos de combustión utilizados a lo largo del quemador. Se observa, al igual que para los contornos presentados en la Figura 4.21 una mayor concordancia entre ED y EDC que para PDF

El modelo PDF predice temperaturas más elevadas en la zona de recirculación exterior en todos los perfiles presentados.

En $Z = 0,1\text{m}$ (perfil derecho), se observa la influencia del distinto patrón de flujo entre el modelo PDF y los modelos EDC y ED.

Para finalizar, en la Figura 4.23 se presentan contornos del campo de temperaturas para los tres modelos aguas abajo del quemador. Se observa como tanto el modelo EDC y el ED tienden a homogeneizar su temperatura aguas abajo. Esta homogeneización tiene lugar antes en el modelo ED (aproximadamente en $Z = 0,55\text{m}$) que en el modelo EDC (aproximadamente en $Z = 0,65\text{ m}$). Esto se explica debido a que el modelo ED predice una zona de recirculación interior (Figura 4.19) mientras que el modelo EDC considera que solo se forma una zona de divergencia interior, sin llegar a recircularse el fluido.

El modelo PDF no muestra un perfil de temperaturas homogéneo aguas abajo del quemador debido a la influencia del distinto frente de llama.

4. Estudio del modelo de combustión

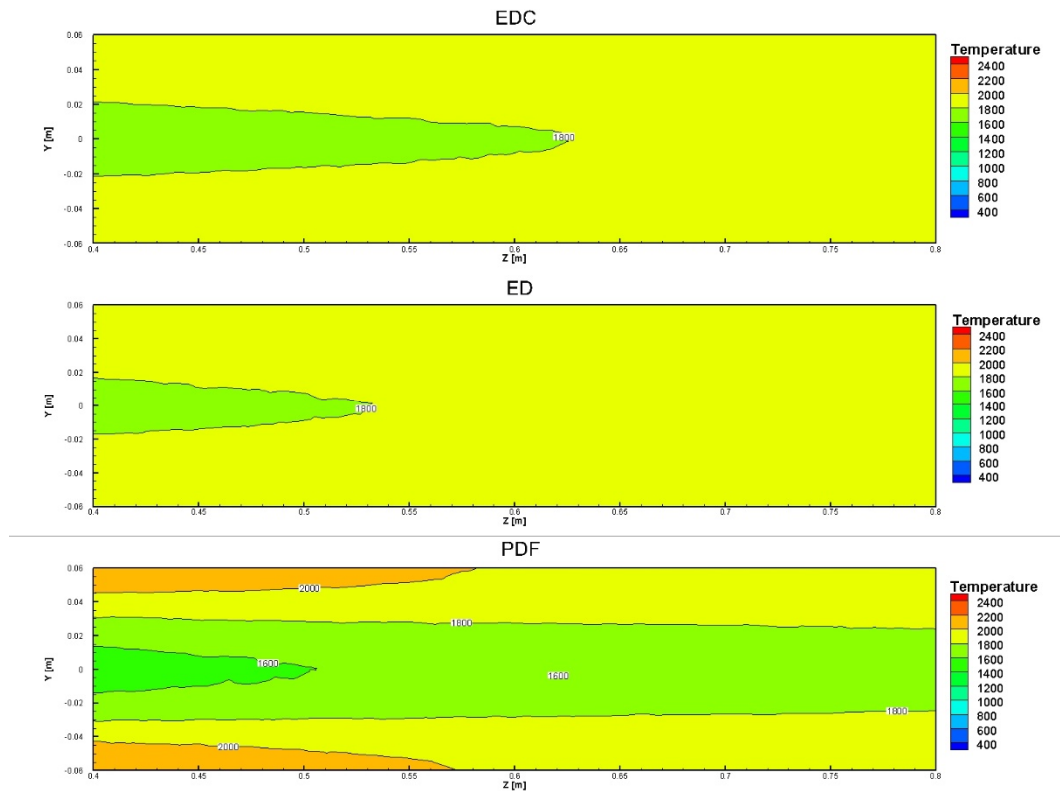


Figura 4.23. Comparativa de contornos de temperatura al final de quemador para los modelos EDC, ED y PDF

4.4. Ubicación del frente de llama

En el Capítulo 2 se ha presentado el concepto de frente de llama y entre los criterios aceptados para su ubicación, se resaltaba la utilización del máximo gradiente de temperaturas. Para el modelo PDF, también existe el criterio de la máxima varianza de fracción mezcla.

En la Figura 4.24 se representa el gradiente de temperaturas para los modelos EDC y ED, junto a la varianza de fracción de mezcla para el modelo PDF.

Se puede esperar a priori, una correlación entre los máximos gradiente de temperaturas y la máxima varianza de fracción de mezcla.

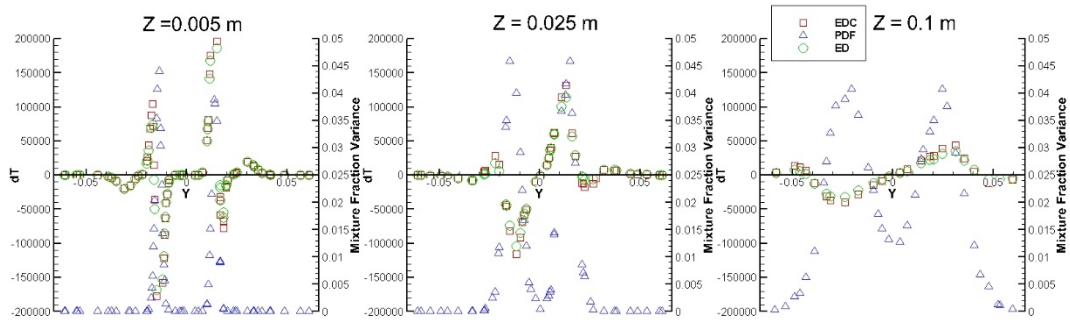


Figura 4.24. Perfiles de varianza de la fracción de mezcla para el modelo PDF y del gradiente de temperatura para los modelos EDC y ED

Se observa como en $Z = 0,005$ y $Z = 0,025$ m, la zona de los máximos gradientes de temperatura de los modelos EDC y ED, corresponde a la zona de máxima varianza de fracción de mezcla para el modelo PDF.

En $Z = 0,1$ m se mantiene esta tendencia, sin embargo, se observa cómo el gradiente de temperatura en los modelos EDC y ED son inferiores a los registrados en las secciones anteriores, mientras que la varianza de fracción de mezcla se mantiene superior a 0,04. Este hecho explica lo observado en los contornos de temperatura de la Figura 4.21. El frente de llama para el modelo PDF es más prolongado, lo que produce el distinto campo de temperaturas observado en con anterioridad.

4.5. Conclusiones

Se ha presentado una comparativa entre los tres modelos de combustión estudiados, *Eddy Dissipation Concept*, *Eddy Dissipation* y *Probability Density Function*. Esto sirve para estudiar la influencia del modelo de combustión en el problema tratado en el presente Trabajo de Fin de Grado.

En todo caso se ha utilizado mezcla estequiométrica y geometría del quemador sin difusor.

Los modelos ED y EDC presente gran concordancia entre los resultados obtenidos mientras que el modelo PDF se aleja de estos.

EDC y PDF predicen la existencia de una zona de divergencia interior mientras que ED considera que tendrá lugar una zona de recirculación interior.

El campo de temperaturas del modelo PDF difiere del obtenido con EDC y ED. Los gases de combustión son expulsados a las paredes del quemador obteniéndose temperaturas de hasta 2400 K mientras que EDC y ED no superan los 1900 K.

Para explicar este fenómeno se ha estudiado la ubicación del frente de llama en los tres modelos mediante la varianza de la fracción de mezcla para PDF y

4. Estudio del modelo de combustión

el gradiente de temperaturas para EDC y ED. Se observa correlación entre la ubicación del frente de llama tanto en EDC y ED, mientras que el modelo PDF presenta un frente de llama más prolongado en el quemador.

En vista de los resultados presentados, se propone que el modelo EDC es el más adecuado para el estudio realizado. La similitud entre los resultados obtenidos por EDC y ED hace pensar que siguen la misma tendencia. Adicionalmente, es importante recordar que el modelo EDC simula directamente las reacciones químicas, no modeladas como en los otros dos modelos, lo que, a priori, supone mayor precisión del modelo.

5. Estudio paramétrico

Índice

5.1. Introducción.....	71
5.2. Influencia de la geometría del difusor	71
5.2.1. Velocidad axial	71
5.2.2. Temperatura.....	72
5.2.3. Fracción másica de CH ₄	73
5.3. Influencia del dosado.....	74
5.4. Conclusiones	75

5.1. Introducción

Hasta el momento se ha presentado el patrón de flujo del caso reactivo y la influencia que el modelo de combustión tenía sobre el resultado obtenido.

El presente capítulo tiene como objetivo estudiar la influencia de otros parámetros como son la geometría del difusor y de la mezcla metano/aire utilizada.

5.2. Influencia de la geometría del difusor

El modelo de quemador descrito en el Capítulo 2 no presenta un difusor a la entrada, sin embargo, es habitual la existencia de un difusor con el fin de guiar al fluido al seno del quemador, evitando cambios bruscos de presión. Este cambio brusco de presión a la entrada es una de las causas de la zona de recirculación exterior.

A continuación, se presentan las diferencias registradas entre un modelo con y sin difusor. Cabe recordar que el modelo de combustión utilizado es el modelo EDC y la mezcla es estequiométrica. El difusor utilizado tiene un semiángulo de 60° .

5.2.1. Velocidad axial

En la Figura 5.25 se presenta los contornos del campo de velocidad axial, observándose la similitud del patrón de flujo entre ambos modelos.

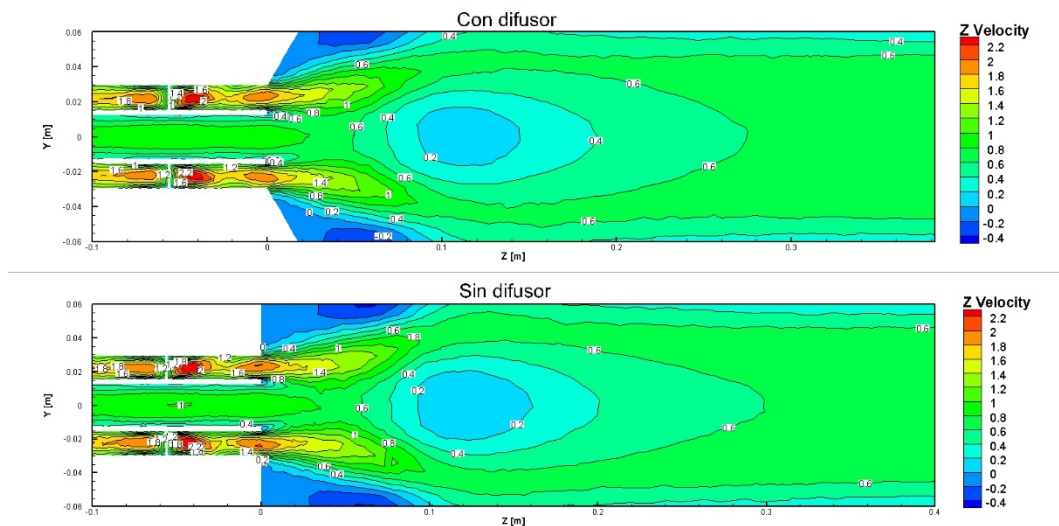


Figura 5.25. Contornos de velocidad axial para los modelos con y sin difusor

El modelo con difusor presenta una zona de divergencia interior de menor intensidad tal y como se predijo a priori. El cambio de presión es menos brusco en el quemador con difusor. Esto también produce una zona de divergencia

interior menos prolongada. Para el caso sin difusor la IDZ llega hasta $Z = 0,16$ m mientras que para el caso con difusor, sólo llega hasta $Z = 0,14$ m.

El resto del campo de velocidad axial es similar en ambos modelos tal y como se puede apreciar en la Figura 5.26.

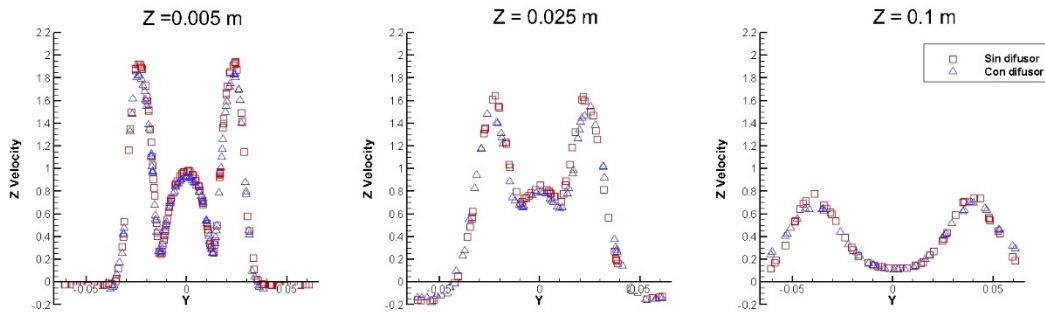


Figura 5.26. Perfiles de velocidad axial para los modelos con y sin difusor

Los resultados mostrados en la Figura 5.25 se ven verificados con los perfiles de velocidad axial presentados en la Figura 5.26. Se observa la relativa similitud entre los datos obtenidos para el modelo con y sin difusor.

5.2.2. Temperatura

La Figura 5.27 presenta los contornos del campo de temperaturas obtenido para los modelos con y sin difusor.

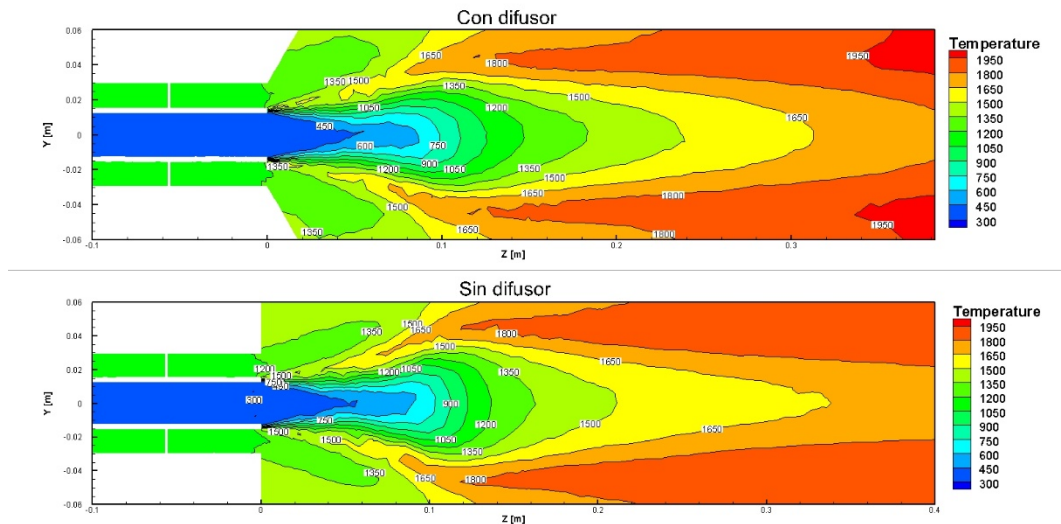


Figura 5.27. Contornos de temperatura para los modelos con y sin difusor.

Se aprecia la correlación entre ambos resultados, aunque con ciertas discrepancias. Para el caso con difusor, al tener una zona de recirculación exterior de menor intensidad, la capa de cortadura entre la zona de recirculación exterior y la zona de divergencia interior es más suave.

5. Estudio paramétrico

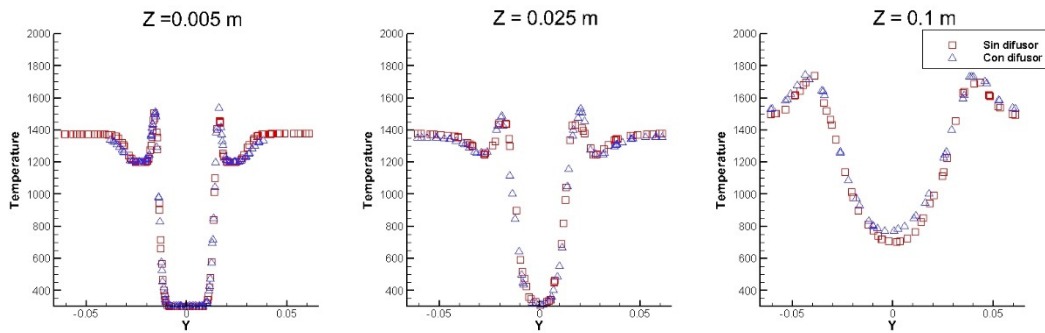


Figura 5.28. Perfiles de temperatura para los modelos con y sin difusor

La Figura 5.28 presenta los perfiles de temperatura para ambos modelos, donde se puede apreciar la similitud de los resultados, si bien, la zona de recirculación exterior para el modelo sin difusor, produce temperaturas ligeramente más elevadas en $Z = 0,005$ m (izquierda) y $Z = 0,025$ m (centro).

5.2.3. Fracción másica de CH_4

Las Figuras Figura 5.29 y Figura 5.30 presentan el comportamiento de la fracción másica de CH_4 . Una vez más, se observa cómo la acción del difusor provoca un flujo menos confinado entre $Z = 0$ y $Z = 0,1$ m debido a la menor intensidad de la zona de recirculación exterior. Esto se aprecia en el menor gradiente de fracción másica de CH_4 a lo largo del eje Z.

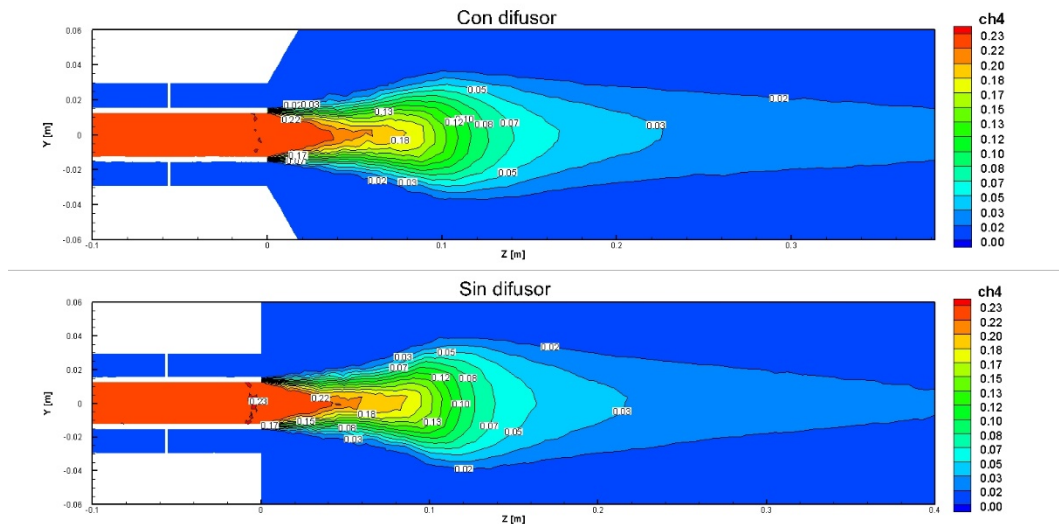


Figura 5.29. Contornos de fracción másica de CH_4 para los modelos con y sin difusor

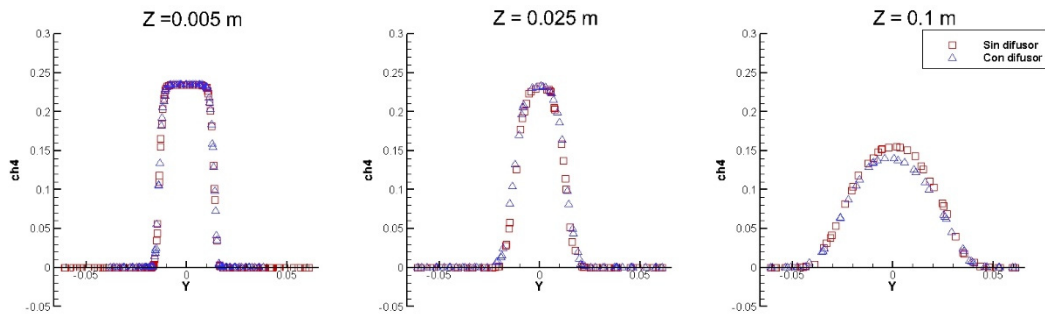


Figura 5.30. Perfiles de fracción másica de CH4 para los modelos con y sin difusor

5.3. Influencia del dosado

Hasta el momento se ha estudiado el caso con mezcla estequiométrica. Se estudia a continuación el uso de mezclas pobres con $\Phi = 0,8$. La Figura 5.31 recoge una comparativa de los resultados obtenidos para ambos dosados para los modelos EDC y PDF. Se presentan los contornos del campo de temperatura y una serie de líneas de corriente.

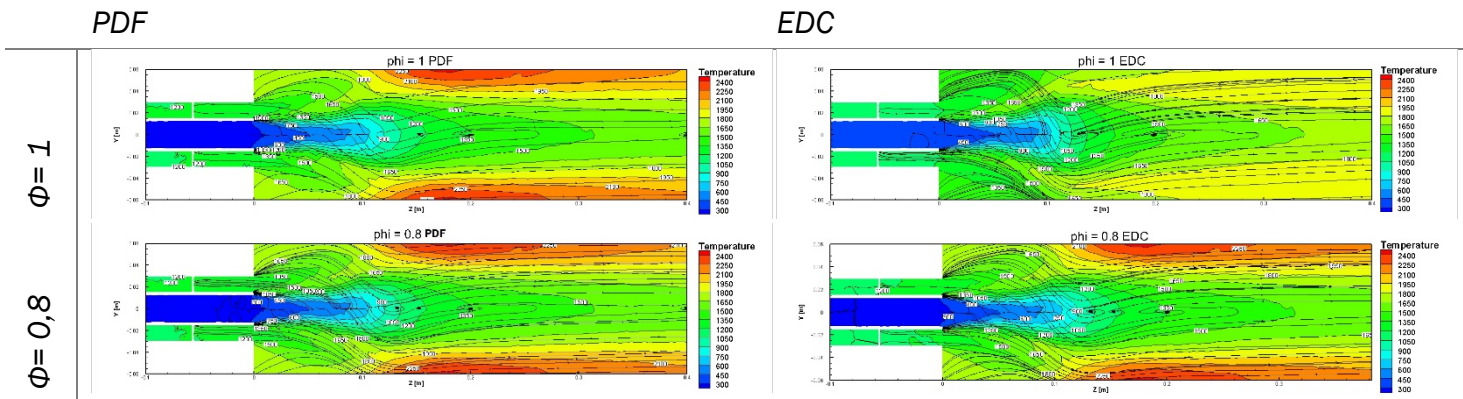


Figura 5.31. Comparativa modelos PDF y EDC en función del dosado

Se presentan los resultados de dos modelos de combustión (PDF y EDC). Existen dudas sobre el resultado obtenido para el modelo EDC con $\Phi = 0,8$ debido a su similitud con el resultado del modelo PDF en vez del resultado EDC.

A priori cabría esperar que una mezcla más pobre produjese menor temperatura en la cámara de combustión debido a la menor concentración de combustible.

No es posible realizar conclusiones sobre la influencia de la mezcla en este Trabajo de Fin de Grado.

5.4. Conclusiones

Se ha estudiado la influencia de la geometría del difusor y del dosado de la mezcla CH₄/aire.

La existencia del difusor a la entrada del quemador produce una expansión más suave que en el caso sin difusor, lo que se traduce en una zona de recirculación exterior de menor intensidad.

La zona de recirculación exterior de menor intensidad produce menor succión del flujo, obteniéndose una zona de divergencia interior más alejada de la salida y más prolongada. Esto produce un menor gradiente de temperatura y fracción másica de CH₄ a lo largo del quemador.

No es posible concluir a la vista de los resultados obtenidos la influencia del dosado de la mezcla. Se presentan dudas respecto a la validez de la simulación obtenida para el caso de dosado $\Phi = 0,8$ y modelo EDC. Se sugiere como posible línea de trabajo futuro para completar el trabajo iniciado.

6. Estudio económico

Índice

6.1. Introducción.....	79
6.2. Costes directos.....	79
6.2.1. Costes directos por personal	79
6.2.2. Costes directos por material amortizable	81
6.2.3. Costes directos por material no amortizable.....	83
6.2.4. Costes directos totales	83
6.3. Costes indirectos.....	83
6.4. Coste total.....	84

6.1. Introducción

El objeto del presente capítulo es la realización de un estudio económico sobre los costes del trabajo realizado con el fin de evaluar su viabilidad económica.

Solo se tendrá en cuenta el coste asociado a la realización del proyecto de investigación, dejando de lado la estimación de los beneficios reportados por la implementación de los resultados obtenidos en un hipotético diseño de quemador de flujo rotante de bajo número de Swirl.

Los costes analizados se dividen en costes directos (Tabla 6.7) e indirectos (Tabla 6.8).

Tabla 6.7. Costes directos analizados

<i>Costes directos</i>	
	Personal
	Material amortizable
	Material no amortizable

Tabla 6.8. Costes indirectos analizados

<i>Costes indirectos</i>	
	Explotación
	Administración y dirección

6.2. Costes directos

Se entiende por costes directos de un objetivo de coste a aquellos costes que son directamente identificables y atribuibles a dicho objetivo de coste. Dentro de los costes directos se estudian aquellos imputables al personal, material amortizable y material no amortizable.

6.2.1. Costes directos por personal

Se denominan costes de personal los gastos asociados con el personal que ha tomado parte en el trabajo de investigación. Engloban los siguientes aspectos:

- Salario bruto de los trabajadores.
- Coste de la seguridad social de la empresa.
- Costes de formación en riesgos laborales y EPI.
- Reconocimientos médicos.
- Repercusión por seguros del convenio laboral.

- Absentismo laboral (justificado o no justificado).
- Beneficios adicionales a los trabajadores no incluidos en los puntos anteriores.

Este Trabajo de Fin de Grado se ha realizado con un único estudiante y la tutela de la profesora responsable, por tanto, se considera un único Ingeniero Mecánico en CFD que recibiría la supervisión del resto de ingenieros Senior de la empresa.

Una vez calculado el coste de un ingeniero de CFD al año, se procede al cálculo del coste por hora. Conocido el coste por hora y las horas dedicadas a cada tarea, se calculan los costes directos por personal.

La Tabla 6.9 recoge los costes directos por personal al año calculados.

Tabla 6.9. Costes directos por personal al año

<i>Salario bruto e incentivos</i>	30.000,00 €/año
<i>Seguridad social (35%)</i>	10.500,00 €/año
<i>Formación sobre riesgos laborales</i>	200,00 €/año
<i>Reconocimiento médico</i>	100,00 €/año
<i>Absentismo laboral (10%)</i>	3.000,00 €/año
Total	43.800,00 €/año

Un año normal tiene 212 días laborables (Tabla 6.10). Tomando una jornada laboral de ocho horas diarias, existen 1696 horas laborales por año. Se obtiene un coste por hora de 25,83 €.

Tabla 6.10. Clasificación de los días anuales

<i>Días totales</i>	365 días
<i>Fines de semana</i>	104 días
<i>Vacaciones</i>	30 días
<i>Días festivos</i>	15 días
<i>Días para asuntos propios</i>	5 días
Total	212 días

Se procede al cálculo de la distribución horaria de las tareas necesarias para la realización de este Trabajo de Fin de Grado

Tabla 6.11. Distribución temporal del trabajo realizado

<i>Etapa</i>	<i>Actividad</i>	<i>Horas empleadas Ingeniero CFD</i>
<i>Investigación previa</i>	Planificación	5
	Documentación	40
<i>Preprocesado</i>	Preparación de modelos	50
<i>Procesado</i>	Resolución computacional	100
<i>Postprocesado</i>	Análisis de resultados	60
<i>Documentación</i>	Redacción	45
<i>Total</i>		300

Tabla 6.12. Costes directos por personal

<i>Horas totales</i>	<i>Coste por hora</i>
300 h	25,83 €/h
<i>Total</i>	7749 €

Los costes directos por personal ascienden a siete mil setecientos cuarenta y nueve euros (Tabla 6.12).

6.2.2. Costes directos por material amortizable

Los costes de material amortizable hacen referencia a los equipos informáticos y licencias de software utilizados. Tienen su origen en la depreciación de los bienes del inmovilizado. Las amortizaciones se calculan linealmente a partir de la inversión inicial según los criterios impuestos por la Hacienda Pública. Como el material utilizado no se usa exclusivamente en este proyecto, sólo se considera la parte proporcional de la amortización de su tiempo total de uso.

El proceso de cálculo es el siguiente:

- Determinar del importe bruto del inmovilizado.
- Calcular el tiempo de uso durante el proyecto.
- Determinar el tiempo total de amortización del inmovilizado.
- Calcular el coste de amortización.

El inmovilizado utilizado es el siguiente (Tabla 6.13):

- Ordenador personal de sobremesa.
- Impresora láser b/n.
- Impresora de inyección color.
- Clúster de computación
- Licencia de software de CFD ANSYS FLUENT 14.0
- Licencia de software del programa de visualización de datos Tecplot EX 2014 R1.
- Licencia de software ofimático Microsoft Office 2013 Professional.

Tabla 6.13. Inversión en inmovilizado amortizable

<i>Ítem</i>	<i>Precio</i>
<i>Ordenador de sobremesa</i>	700,00 €
<i>Impresora láser b/n</i>	400,00 €
<i>Impresora de inyección color</i>	72,00 €
<i>Clúster de computación</i>	4.000,00 €
<i>ANSYS Fluent® v14.0</i>	7.000,00 €
<i>Tecplot® EX 2014 R1</i>	3.948,84 €
<i>Microsoft Office 2013®</i>	539,00 €
<i>Total</i>	16.659,84 €

El tiempo total de amortización del inmovilizado se considera de tres años, trabajando ocho horas diarias durante 212 días (5088 horas en total). El valor residual del software es nulo y de un 5% para el resto del inmovilizado debido a que partes pueden ser reutilizadas (Tabla 6.14).

Tabla 6.14. Costes directos del material amortizable

<i>Inmovilizado amortizable</i>	<i>Valor residual</i>	<i>Coste unitario de amortización por hora</i>	<i>Horas de utilización</i>	<i>Coste de amortización</i>
<i>Ordenador de sobremesa</i>	35,00 €	0,14 €	300	41,27 €
<i>Impresora láser b/n</i>	20,00 €	0,08 €	20	1,57 €
<i>Impresora de inyección color</i>	3,60 €	0,01 €	20	0,28 €
<i>Clúster de computación</i>	200,00 €	0,79 €	1500	1.179,25 €
<i>ANSYS Fluent® v14.0</i>	- €	1,38 €	1700	2.338,84 €
<i>Tecplot® EX 2014 R1</i>	- €	0,78 €	100	77,61 €
<i>Microsoft Office 2013®</i>	- €	0,11 €	45	4,77 €
<i>Total</i>				3.643,59 €

Los costes directos de material amortizable ascienden a tres mil seiscientos cuarenta y tres euros con cincuenta y nueve céntimos.

6.2.3. Costes directos por material no amortizable

Los costes directos por material no amortizable comprenden los materiales fungibles, materiales no inventariables, costes de documentación y otros costes no tenidos en cuenta anteriormente. La Tabla 6.15 presenta estos costes.

Tabla 6.15. Costes directos del material no amortizable

<i>Ítem</i>	<i>Precio</i>
<i>Material no inventariable</i>	100,00 €
<i>Material de representación gráfica</i>	100,00 €
<i>Encuadernación</i>	150,00 €
<i>Total</i>	350,00 €

Los costes directos del material no amortizable ascienden a trescientos cincuenta euros.

6.2.4. Costes directos totales

Se calculan los costes directos totales sumando las tres categorías presentadas (Tabla 6.16).

Tabla 6.16. Resumen de costes directos totales

<i>Ítem</i>	<i>Precio</i>
<i>Costes directos por personales</i>	7.749,00 €
<i>Costes directos por materiales amortizable</i>	16.659,84 €
<i>Costes directos por materiales no amortizable</i>	350,00 €
<i>Total</i>	24.758,84 €

Los costes directos totales ascienden a veinticuatro mil setecientos cincuenta y ocho euros con ochenta y cuatro céntimos.

6.3. Costes indirectos

Los costes indirectos engloban gastos que derivan globalmente de las actividades de una empresa no imputables a ninguna actividad en concreto. Están integrados por los gastos de explotación (electricidad, telecomunicaciones, servicios comunitarios) y los gastos de administración y dirección. Estos se recogen en la

Tabla 6.17.

Tabla 6.17. Resumen de costes indirectos totales

<i>Ítem</i>	<i>Precio</i>
<i>Costes de explotación</i>	250,49 €
<i>Costes de administración y dirección</i>	330,55 €
<i>Total</i>	581,04 €

Los costes indirectos totales ascienden a quinientos ochenta y un euros con cuatro céntimos.

6.4. Coste total

Se calcula el coste total sumando los costes directos e indirectos calculados con anterioridad. La Tabla 6.18 recoge los costes totales de este trabajo de investigación.

Tabla 6.18. Costes totales del trabajo de investigación realizado

<i>Ítem</i>	<i>Precio</i>
<i>Costes directos</i>	24.758,84 €
<i>Costes indirectos</i>	581,04 €
<i>Total</i>	25.339,88 €

El coste total si este Trabajo de Fin de Grado hubiera sido realizado en la industria sería de veinticinco mil trescientos treinta y nueve euros con ochenta y ocho céntimos.

7. Conclusiones

Índice

7.1. Introducción.....	89
7.2. Conclusiones	89
7.3. Agradecimientos	90
7.4. Publicaciones	90
7.5. Trabajos futuros	91

7.1. Introducción

En el presente capítulo se recogen las principales conclusiones del Trabajo de Fin de Grado realizado.

Adicionalmente, se recogen una serie de propuestas de posibles líneas de investigación futuras, un agradecimiento al Consejo Social de la Universidad de Valladolid y la publicación realizada.

7.2. Conclusiones

Se han establecido los fundamentos teóricos y operacionales del problema de quemador con un Swirl medio.

Se ha seleccionado el modelo k-epsilon RNG Swirl Dominated y se ha validado mediante datos experimentales para el caso no reactivo.

La malla utilizada es seleccionada tras un análisis de sensibilidad de malla. Se observa que el aumento de la resolución espacial hasta 800.000 celdas en el modelo no produce mejor resolución en el perfil de temperaturas, por tanto, se concluye en utilizar un modelo de 400.000 celdas.

Se ha descrito el patrón de flujo de la simulación numérica realizada para el modelo de combustión EDC, con mezcla estequiométrica y sin difusor. El patrón de flujo se presenta mediante el estudio del campo de velocidad axial, temperatura y fracción másica de CH_4 .

Se ha observado que el flujo en el quemador viene determinado por la existencia de una zona de recirculación exterior y otra zona de divergencia interior. Estos fenómenos fijan la posición del frente de llama. Los máximos gradientes de temperatura y fracción másica de CH_4 ayudan a determinar la ubicación del frente de llama.

Se ha presentado una comparativa entre las prestaciones de tres modelos de combustión estudiados, *Eddy Dissipation Concept*, *Eddy Dissipation* y *Probability Density Function*. Se ha concluido que el modelo EDC es el más apropiado para este Trabajo de Fin de Grado debido a que permite obtener resultados precisos con un coste computacional aceptable.

EDC y PDF predicen la existencia de una zona de divergencia interior mientras que ED considera que tendrá lugar una zona de recirculación interior.

El campo de temperaturas del modelo PDF difiere del obtenido con EDC y ED. Los gases de combustión son expulsados a las paredes del quemador obteniéndose temperaturas de hasta 2400 K mientras que EDC y ED no superan los 1900 K.

Se ha estudiado la ubicación del frente de llama en los tres modelos mediante la varianza de la fracción de mezcla para PDF y el gradiente de temperaturas para EDC y ED. Se observa correlación entre la ubicación del frente de llama tanto en EDC y ED, mientras que el modelo PDF presenta un frente de llama más prolongado en el quemador.

Se ha estudiado la influencia de la geometría del difusor y del dosado de la mezcla CH₄/aire.

La existencia del difusor a la entrada del quemador produce una expansión más suave que en el caso sin difusor, lo que se traduce en una zona de recirculación exterior de menor intensidad.

La zona de recirculación exterior de menor intensidad produce menor succión del flujo, obteniéndose una zona de divergencia interior más alejada de la salida y más prolongada. Esto produce un menor gradiente de temperatura y fracción másica de CH₄ a lo largo del quemador.

No es posible concluir a la vista de los resultados obtenidos la influencia del dosado de la mezcla. Se presentan dudas respecto a la validez de la simulación obtenida para el caso de dosado $\Phi = 0,8$ y modelo EDC. Se sugiere como posible línea de trabajo futuro para completar el trabajo iniciado.

7.3. Agradecimientos

Este Trabajo de Fin de Grado ha sido realizado en colaboración con el Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica con una Beca del Consejo Social de colaboración en tareas de investigación en departamentos e institutos L.O.U de la Universidad de Valladolid.

7.4. Publicaciones

Este Trabajo de Fin de Grado se ha materializado en la siguiente publicación:

AUTORES: Teresa Parra, Jose R. Perez, Javier M. Zamora, Miguel A. Rodriguez

TÍTULO: Beta -PDF numerical modeling of swirling flames

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Coautor

CONGRESO: 7th EUROPEAN COMBUSTION MEETING

ACTAS: Proceedings of the 7th European Combustion Meeting - 2015 P2-52

ISBN 978-963-12-1257-0

LUGAR CELEBRACIÓN: Budapest, Hungría

FECHA: 30 marzo – 2 abril, 2015

7.5. Trabajos futuros

Debido a las limitaciones temporales y presupuestarias de este Trabajo de Fin de Grado, se proponen a continuación una serie de sugerencias de posibles trabajos futuros para continuar la investigación en quemadores de flujo rotante.

- Estudio de emisiones de NO_x. Uno de los principales usos de los quemadores de flujo rotante es la reducción de emisiones de NO_x. Se propone estudiar y comparar las emisiones de NO_x en función de los parámetros analizados (geometría, mezcla, modelo de combustión)
- Uso de una malla estructurada y más refinada con el fin de trabajar con mejor resolución espacial.
- Estudio de mezcla pobre con $\Phi = 0,8$. Debido a los problemas presentados en el Capítulo 5, los resultados obtenidos no son concluyentes. Se sugiere repetir la simulación y contrastar ese modelo.
- Estudio de una mezcla más pobre. En el presente trabajo se ha realizado una comparativa entre mezcla estequiométrica ($\Phi = 1$) y mezcla pobre ($\Phi = 0,8$). Se propone estudiar mezclas con $\Phi = 0,6$ para encontrar el límite de flamabilidad para mezclas pobres.
- Comparativa con un modelado mediante Large Eddy Simulation (LES). Debido al alto coste computacional, no ha sido posible utilizar este modelo. Al calcular las escalas intermedias turbulentas, se espera que una simulación mediante LES presente mayor precisión que el modelado RANS realizado.
- Mecanismo GRI Mech 3.0 para EDC. El modelo EDC utilizado simplemente utiliza 5 reacciones para el modelado de la combustión debido al elevado coste computacional a la simulación. Se sugiere el uso de un mecanismo de combustión completo, como GRI Mech 3.0, en el que más de 200 reacciones químicas son calculadas.
- En el presente estudio no se ha modelado la transmisión de energía por radiación debido al coste computacional asociado. Se propone ampliar el modelado realizado añadiendo el modelado de la radiación.
- Estudio experimental para validar los resultados simulados. Este es sin duda la propuesta de trabajo futuro más ambiciosa debido al coste en equipamiento y formación de personal que conlleva el estudio experimental en combustión. Se propone buscar la colaboración de otros equipos de investigación para poder llevar a cabo este trabajo.

8. Bibliografía

- Anderson, J. D. (1995). *COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS. The Basics with Applications*. McGraw-Hill, Inc.
- ANSYS. (2009). *ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide*. ANSYS, Inc.
- Domínguez, J. R. (2013). *PROYECTO FIN DE CARRERA - OPTIMIZACIÓN DEL DISEÑO DE UN GENERADOR DE SWIRL Y CARACTERIZACIÓN AERODINÁMICA DEL QUEMADOR DE FLUJO ROTANTE*. Valladolid: Universidad de Valladolid.
- Jacobs, G. B. (2008). Direct Numerical Simulation of Turbulent Flows Using Spectral Methods. *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (pp. AIAA 2008-1450). Reno, Nevada: American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- Kolmogorov, A. (1941). LOCAL STRUCTURE OF TURBULENCE IN AN INCOMPRESSIBLE VISCOUS FLUID AT VERY LARGE REYNOLDS NUMBERS. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 30:4, 299-301.
- M. Germano, U. P. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A* 3 (7), 1760-1765.
- Magnussen, B., & Hjertager, B. (1977). On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion* (pp. 719-729). Elsevier, Inc.
- Mockett, C. (2009). *A comprehensive study of detached-eddy simulation*. Berlin: Technischen Universität Berlin.
- Poinsot, T., & Veynante, D. (2012). *Theoretical and Numerical Combustion*.
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
- Red Eléctrica Corporación. (2014). *Informe de responsabilidad corporativa*. Madrid: Red Eléctrica.
- Roback, R., & Johnson, B. (1983). Mass and momentum turbulent transport experiments with confined swirling coaxial jets. *NASA CR-168252*.
- SODJA, J. (2007). *Turbulence models in CFD*. University of Ljubljana .

Versteeg, H., & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics The Finite Volume Method*. PEARSON Prentice Hall.

Anexo I

En el presente Anexo se detalla el informe completo exportado del software ANSYS Fluent que define completamente el modelo numérico realizado. Se detallan los siguientes apartados:

Models	99
Material Properties.....	100
Cell Zone Conditions	114
Boundary Conditions.....	117
Solver Settings.....	122

Fluent

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

Release: 14.5.7

Title:

8.1. A.1 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	Reacting (8 species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Disabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

8.2. A.2 Material Properties

Material: (carbon-monoxide . methane-air-1) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.38986 0.44878771 -0.0011522171 1.6568822e-06 -7.34637e-10) (1000-5000: 897.93053 0.42823161 -0.00016713923 3.0234435e-08 -2.05137e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.01055
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053956e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197531.64
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (nitrogen-oxide . methane-air-1) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 935.60007 0.34720925 -0.00091515347 1.4457943e-06 -6.7783063e-10) (1000- 5000: 899.27216 0.35166341 -0.00013898446 2.5407012e-08 - 1.7388453e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.0061
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	90288480
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	210640
Reference Temperature	k	constant	298
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: nitrogen-oxide (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 935.60007 0.34720925 -0.00091515347 1.4457943e-06 -6.7783063e-10) (1000- 5000: 899.27216 0.35166341 -0.00013898446 2.5407012e-08 - 1.7388453e-12)

Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.0061
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	90288480
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	210640
Reference Temperature	k	constant	298
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: nitrogen (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	constant	1.138
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04298 0.4179639 -0.0011762792 1.6743943e-06 -7.2562971e-10) (1000-5000: 868.62291 0.44162954 -0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0242
Viscosity	kg/m-s	constant	1.663e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.78
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: carbon-monoxide (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	constant	1.1233
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.38986 0.44878771 -0.0011522171 1.6568822e-06 -7.34637e-10) (1000-5000: 897.93053 0.42823161 -0.00016713923 3.0234435e-08 -2.05137e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.025
Viscosity	kg/m-s	constant	1.75e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.01055
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053956e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197531.64
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0

Speed of Sound m/s none #f

Material: c5h3 (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 570.55554 3.100733 -0.00077195699 -1.6020472e-06 1.0184038e-09) (1000-5000: 1421.884 1.2573884 -0.00042267125 6.2388505e-08 -3.3111694e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	63.07966
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	5.6658099e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	295104.7
Reference Temperature	k	constant	298
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: c2h6 (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 404.39609 4.284319 0.0015983264 -3.4779406e-06 1.2681157e-09) (1000-4000: 1334.3854 3.8269175 -0.0012600946 1.8594723e-07 -9.9490163e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0207
Viscosity	kg/m-s	constant	9.29e-06
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30.06964
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-83858870
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228975.66
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: c3h8 (fluid)

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

Density kg/m³ constant 1
 Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 169.11322
 5.0323375 0.0010240879 -4.0085446e-06 1.7428175e-09) (1000-5000:
 1418.8696 3.5617484 -0.0011848255 1.7307585e-07 -9.0737348e-12)
 Thermal Conductivity w/m-k constant 0.0177
 Viscosity kg/m-s constant 7.95e-06
 Molecular Weight kg/kgmol constant 44.09652
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -1.0385346e+08
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 270174.91
 Reference Temperature k constant 298.15
 Thermal Expansion Coefficient 1/k constant 0
 Speed of Sound m/s none #f

Material: c4h10 (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	constant	1
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: -322.80096 8.4136027 -0.0064739658 2.9140186e-06 -5.8355156e-10) (1500-4000: 2859.1875 1.4837921 -0.00013747924 -6.6130569e-08 1.1733846e-11)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0159
Viscosity	kg/m-s	constant	7e-06
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	58.1234
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.332158e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	300441.87
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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)
----------	-------	--------	----------

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)
----------	-------	--------	----------

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: (ho2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (no2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (n . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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)
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: (h2o<I> . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(273.15-1000: 5867.1523 -8.1516602 -0.01041026 9.6091785e-05 -1.1112664e-07) (1000-1000: 0 0 0 0 0 0)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01528
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.8584163e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	69940.119
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
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: pdf-mixture (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species		names	(ch4 n2 o2 add h2o co2 co h2 h oh h2o<l> o no n no2 ho2 nh3 nh hno n2o)
Reaction		finite-rate	()
Mechanism		reaction-mechs	((mechanism-1 (reaction- type . all) (reaction-list) (site-info)))
Density	kg/m3	incompressible-ideal-gas	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Mass Diffusivity	m2/s	constant-dilute-appx	(2.88e-05)
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
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: (o . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (h2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (h . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (co . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (h2o . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (o2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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)
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: (co2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (ch4 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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: (additive . methane-air-1) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
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-1 (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species		names	((ch4 o2 co2 h2o additive no co n2) () ())
Reaction		finite-rate	((reaction-1 ((ch4 1 1.46 1) (o2 1.5 0.5217 1)) ((co 1 0 1) (h2o 2 0 1)) ((co2 0 1) (additive 0 1) (no 0 1) (n2 0 1)) (stoichiometry 1ch4 + 1.5o2 -> 1co + 2h2o) (arrhenius 1.6596e+15 1.72e+08 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-2 ((co 1 1.6904 1) (o2 0.5 1.57 1)) ((co2 1 0 1)) ((ch4 0 1) (h2o 0 1) (additive 0 1) (no 0 1) (n2 0 1)) (stoichiometry 1co + 0.5o2 -> 1co2) (arrhenius 7.9799e+14 96540000 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-3 ((co2 1 1 1)) ((co 1 0 1) (o2 0.5 0 1)) ((ch4 0 1) (h2o 0 1) (additive 0 1) (no 0 1) (n2 0 1)) (stoichiometry 1co2 -> 1co + 0.5o2) (arrhenius 2.2336e+14 5.1774e+08 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-4 ((n2 1 0 1) (o2 1 4.0111 1) (o2 0 0.7211 1)) ((no 2 0 1) (co 0 0 1)) ((ch4 0 1) (co2 0 1) (h2o 0 1) (additive 0 1)) (stoichiometry 1n2 + 1o2 + 0o2 -> 2no + 0co) (arrhenius 8.8308e+23 4.4366e+08 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-5 ((n2 1 1 1) (o2 1 0.5 1)) ((no 2 0 1)) ((ch4 0 1) (co2 0 1) (h2o 0 1) (additive 0 1) (co 0 1)) (stoichiometry 1n2 + 1o2 -> 2no) (arrhenius 9.2683e+14 5.7276e+08 -0.5) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)))
Mechanism		reaction-mechs	((mechanism-1 (reaction-type . all) (reaction-list reaction-5 reaction-4 reaction-3 reaction-2 reaction-1) (site-info)))
Density	kg/m3	incompressible-ideal-gas	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.045400001
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Mass Diffusivity	m2/s	constant-dilute-appx	(2.8799999e-05)
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (nitrogen . methane-air-1) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04298 0.4179639 -0.0011762792 1.6743943e-06 -7.2562971e-10) (1000-5000: 868.62291 0.44162954 -0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.78
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (water-vapor . methane-air-1) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.0767 1.6037546 -0.0029327841 3.2161009e-06 -1.1568268e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 -0.00040291411 5.5427718e-08 -2.949824e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01534
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.418379e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188696.44
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (carbon-dioxide . methane-air-1) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.92889 1.8744735 -0.001966485 1.2972514e-06 -3.9999562e-10) (1000-5000: 841.37645 0.59323928 -0.00024151675 4.5227279e-08 -3.1531301e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.00995
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9353235e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (oxygen . methane-air-1) (fluid)

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

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 834.82647
0.29295801 -0.00014956371 3.4138849e-07 -2.2783585e-10) (1000-
5000: 960.75234 0.15941258 -3.2708852e-05 4.6127648e-09 -
2.9528324e-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-1) (fluid)

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

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 403.5847
9.0573346 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.3430511e-09) (1000-5000:
872.46708 5.3054727 -0.002008295 3.5166462e-07 -2.3339102e-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: aluminum (solid)

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

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

8.3. A.3 Cell Zone Conditions

Zones

name	id	type
zone1	2	fluid

Setup Conditions

zone1

Condition	Value

Material Name	methane-air-1
Specify source terms?	no
Source Terms	((mass) (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum) (k) (epsilon) (species-0) (species-1) (species-2) (species-3) (species-4) (energy))
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Fixed Values	((x-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (y-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (z-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (k (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (epsilon (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (species-0 (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (species-1 (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (species-2 (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (species-3 (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (species-4 (inactive . #f) (constant . 0) (profile)) (temperature (inactive . #f) (constant . 0) (profile)))
Frame Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)	0
Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (m)	0

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

Direction-2 Viscous Resistance (1/m ²)	0	
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/m ² -k)	1	
Reaction Mechanism	0	
Activate reaction mechanisms?		yes
Surface-Volume-Ratio (1/m)	0	

8.4. A.4 Boundary Conditions

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

Condition	Value
-----------	-------

Gauge Pressure (pascal)	0
Backflow Total Temperature (k)	2000
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	2
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	5
Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no

Backflow (((constant . 0) (profile)) ((constant . 0.22) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)))
 is zone used in mixing-plane model? no
 Radial Equilibrium Pressure Distribution no
 Specify Average Pressure Specification no
 Specify targeted mass flow rate no
 Targeted mass flow (kg/s) 1
 Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal) 5000000
 Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal) 1

outer_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	1200
Turbulent Specification Method	1
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	7.4999998
Turbulent Length Scale (m)	0.014
Hydraulic Diameter (m)	1
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no

```

(((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.22)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
is zone used in mixing-plane model?      no

```

inner_inlet

Condition	Value
-----------	-------

Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	0.66
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	300
Turbulent Specification Method	1
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	12
Turbulent Length Scale (m)	0.025
Hydraulic Diameter (m)	1
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no
(((constant . 0.234) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0.766) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)))	
is zone used in mixing-plane model?	no

wall-1

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

Y-component of shear stress (pascal)		0
Z-component of shear stress (pascal)		0
Fslip constant	0	
Eslip constant	0	
Surface tension gradient (n/m-k)		0
Specularity Coefficient	0	
Convective Augmentation Factor		1

8.5. A.5 Solver Settings

Equations

Equation	Solved
Flow	yes
Turbulence	yes
ch4	yes
o2	yes
co2	yes
h2o	yes
additive	yes
no	yes
co	yes
Energy	yes

Numerics

Numeric	Enabled
Absolute Velocity Formulation	yes

Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Pressure	0.3
Density	0.5
Body Forces	1
Momentum	0.7
Turbulent Kinetic Energy	0.8
Turbulent Dissipation Rate	0.8
Turbulent Viscosity	1
Species	0.60000002
Energy	0.60000002

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
ch4	Flexible	0.1	0.7
o2	Flexible	0.1	0.7
co2	Flexible	0.1	0.7
h2o	Flexible	0.1	0.7
additive	Flexible	0.1	0.7
no	Flexible	0.1	0.7
co	Flexible	0.1	0.7
Energy	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	First Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	First Order Upwind
ch4	Second Order Upwind
o2	Second Order Upwind
co2	Second Order Upwind
h2o	Second Order Upwind
additive	Second Order Upwind
no	Second Order Upwind
co	Second Order Upwind
Energy	Second Order Upwind

Solution Limits

Quantity	Limit
----------	-------

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

7. Conclusiones