



Universidad de Valladolid

ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ENERGÉTICA Y
FLUIDOMECÁNICA**

TESIS DOCTORAL:

**AERODINÁMICA, TURBULENCIA Y COMBUSTIÓN NO
PREMEZCLADA EN QUEMADORES DE FLUJO ROTANTE**

Presentada por **José Rubén Pérez Domínguez** para optar al
grado de doctor por la Universidad de Valladolid

Dirigida por:

María Teresa Parra Santos

Francisco Castro Ruiz

A mis Padres, a Raquel y a Diana

AGRADECIMIENTOS

Quizá esta página sea la más complicada de toda esta tesis. Es difícil agradecer de forma breve y solo con palabras, la ayuda que todos me habéis prestado. Sin duda no habría sido posible llegar hasta aquí sin todos vosotros.

En primer lugar quiero mostrar mi más sincero agradecimiento a Teresa Parra, la directora de esta tesis. Su generosidad, paciencia, criterio, amabilidad, motivación, trato, enseñanzas, apoyo, dedicación y confianza durante estos años han sido excepcionales. Siempre estaré en deuda. Aprovecho esta ocasión para presentarle mi reconocimiento y admiración, tanto profesional como personal.

Hago extensible mi agradecimiento a Francisco Castro, codirector de esta tesis. Quiero agradecer la confianza en mí, desde los primeros trabajos en 2010, hasta hoy. Su ayuda, sugerencias y conocimientos han sido muy valiosos.

También quiero mostrar mi gratitud a todos los miembros del área de Mecánica de Fluidos del departamento de Ingeniería Energética por su acogida, ayuda y excelente trato.

Quiero agradecer a mis padres no solo la oportunidad que me han dado de poder llegar hasta aquí, sino todo el esfuerzo que me han dedicado y los valores que me han inculcado, porque son un ejemplo a seguir en cada paso que doy.

Raquel, sin duda no podría tener mejor hermana.

Diana, en especial gracias a ti esta tesis ha llegado a feliz término. Gracias por apoyarme, ayudarme, cuidarme, divertirme y hacerme feliz. Siendo un equipo todo es mejor. Muchas gracias por todo.

También tengo que dar las gracias a toda mi familia, amigos y compañeros porque siempre han estado cuando lo he necesitado.

A mis abuelos Emilio y Honorio porque aunque no os encontréis entre nosotros, siempre seréis recordados.

A todos los compañeros del departamento, Julio, Diego, Pablo, Fernando...

A todos mis amigos. Gracias por hacerme pasar tan buenos ratos.

¡Muchas gracias a todos!

RESUMEN

Los quemadores de flujo rotante juegan un papel fundamental en la industria y en concreto en las turbinas de gas, ya que permiten la estabilización de la llama con dosados pobres, lo que haría factible disminuir las emisiones de NO_x y el consumo de combustible. Además, producen poca pérdida de carga y hollín lo que reduce las tareas de mantenimiento. A pesar de ser una de las configuraciones más empleadas por su sencillez y seguridad, actualmente, no existe una clara metodología ni para la simulación ni para la validación de la combustión no premezclada en flujos turbulentos, lo que resalta el carácter innovador de este trabajo.

Esta tesis, la primera de la línea de investigación de quemadores de flujo rotante del grupo de mecánica de fluidos de la Universidad de Valladolid, recoge los trabajos realizados acerca de la aerodinámica, turbulencia y combustión no premezclada en este tipo de quemadores. El objetivo principal es establecer las bases y la metodología de trabajos futuros en el modelado numérico, isoterma o reactivo, mediante RANS o LES en estos quemadores.

Se ha realizado una revisión bibliográfica de los aspectos más importantes de la combustión y del análisis de flujos reactivos, centrándose principalmente en combustión no premezclada, estabilización de la llama, flujos rotantes y las herramientas de simulación existentes.

Primero, se han desarrollado y validado modelos CFD isotermos mediante RANS, con un código comercial (Ansys Fluent) y uno libre (OpenFOAM) de un quemador de flujo rotante. Se han empleado dichos modelos para diseñar dos generadores de swirl, uno más sencillo, de placas planas y otro más complejo, de aletas curvas, con menor pérdida de carga. Se han estudiado, en el quemador de flujo rotante, la estructura aerodinámica y el mezclado. Adicionalmente se evalúa la influencia en el flujo del número de swirl así como el efecto en éste de incluir un difusor cónico. Se han encontrado dificultades al tratar de validar modelos de flujo rotante, debido a la heterogeneidad en la literatura en la evaluación del número de swirl. Los modelos RANS analizados no predicen adecuadamente la anisotropía de las zonas de recirculación y la existencia de inestabilidades o fenómenos transitorios como el PVC.

Posteriormente, con el objeto obtener una predicción más precisa del flujo, se ha realizado un análisis isoterma transitorio mediante técnicas numéricas novedosas en simulaciones de grandes remolinos (ILES SSD). Una pequeña estructura de vórtices, asociada a números de swirl bajos y medios, relacionada con las inestabilidades de Couette-Taylor, ha sido descubierta gracias a la resolución de las grandes escalas en simulaciones LES. Los modelos LES han permitido determinar que el PVC gira alrededor del eje con un número de Strouhal de 2.83 aproximadamente. Además, se ha podido realizar un análisis POD, caracterizar el espectro de energía y determinar la estructura de los vórtices.

Por último, se han desarrollado varios modelos CFD de combustión mediante RANS, desde los más sencillos en el que la combustión viene determinada por el mezclado, métodos estadísticos, hasta métodos semidetallados. Se comparan los

resultados frente a la temperatura adiabática de llama, obtenida con un mecanismo de reacción GRI-Mech 3.0. Se determina que el modelo de combustión PDF proporciona el mejor ajuste.

Las tendencias generales, relativas a la estructura del flujo, indican que el aumento del número de swirl, incrementa la zona de recirculación interior (IRZ) y reduce tanto la zona de recirculación exterior (ORZ) como el espesor de llama. Se deduce que el uso de difusores cónicos minimiza o elimina la ORZ. Adicionalmente, se encuentra un semiángulo de difusor intermedio que optimiza el mezclado. Se detecta una reducción del número de swirl, situada entre un 10% y un 27%, en caso de tener flujo reactivo, debido a la expansión de los productos de combustión y al precalentado del aire de la tobera exterior.

ABSTRACT

Swirl burners play a key role in industry and specifically in gas turbines because they allow flame stabilization with a lean fuel-air equivalence ratio, what would make possible to reduce NO_x emissions and fuel consumption. Furthermore, they produce low pressure drop and soot levels, what reduces maintenance tasks. Despite being one of the most used configurations because of its simplicity and safety, currently, there is no clear methodology neither for simulation nor for validation of non-premixed combustion in turbulent flows, which highlights the innovative nature of this work.

This thesis is the first of the line of research about combustion in swirling flows in burners of fluid mechanics group at the University of Valladolid. This work collects the research done on aerodynamics, turbulence and non-premixed combustion in swirl burners. The main aim is to lay the foundations and methodology for future work on numeric, isothermal or reactive modelling, using RANS or LES in these burners.

A literature review of the most important aspects of combustion and analysis of reactive flows has been conducted, focusing mainly on non-premixed combustion, flame stabilization, swirling flows and existing simulation tools.

Firstly, isothermal CFD models have been developed and validated using RANS, with a commercial code (Ansys Fluent) and one free code (OpenFOAM) of a swirl burner. These models have been used to design two swirl generators, one simpler, with flat plates and another, more complex, of curved vanes with lower pressure drop. Aerodynamic structure and mixing in the swirl burner have been studied. Additionally, the influence on the flow of the swirl number is evaluated, as well as the effect of including a conical diffuser. Difficulties have been encountered in trying to validate swirling flows models due to heterogeneity in the literature assessing the swirl number. The analysed RANS models fail to adequately predict the anisotropy of the recirculation zones and the existence of instabilities or transient phenomena such as PVC.

Subsequently, in order to get a more accurate prediction of flow, an isothermal transient analysis has been performed through novel numerical techniques in large eddy simulations (ILES SSD). A small vortex structure, associated with low and medium swirl numbers, which is related with Couette-Taylor instabilities, has been discovered by the resolution of large scales in LES. LES models have established that the PVC rotates about the axis with a Strouhal number of about 2.83. Furthermore, a POD analysis has been performed, the energy spectrum characterized and the structure of the vortices determined.

Finally, several CFD combustion models have been developed by RANS techniques, from the simplest in which combustion is determined by mixing, statistical methods, to semi-detailed methods. The results are compared to the adiabatic flame temperature, which is obtained with a GRI-Mech 3.0 reaction mechanism. It is determined that the PDF combustion model provides the best fit.

General trends regarding the flow structure indicate that if swirl number increases, the internal recirculation zone (IRZ) rises, and the outer recirculation zone (ORZ) and flame thickness decrease. The use of conical diffusers minimizes or eliminates the ORZ. Additionally, an intermediate angle of diffuser, which optimizes mixing, has been found. A reduction of the swirl number has been detected, between 10% and 27%, in the case of reactant flow, due to the expansion of the combustion products and preheated air of the outer nozzle.

ÍNDICE

1	INTRODUCCIÓN	3
1.1	PRESENTACIÓN	3
1.2	JUSTIFICACIÓN.....	4
1.3	ANTECEDENTES.....	5
1.4	OBJETIVOS	6
1.5	CONTENIDOS DE LA MEMORIA	6
1.6	REFERENCIAS	7
2	ESTADO DEL ARTE.....	11
2.1	INTRODUCCIÓN.....	11
2.2	COMBUSTIÓN.....	11
2.2.1	Clasificación de la combustión	11
2.2.2	Parámetros importantes.....	12
2.2.3	Combustión premezclada.....	14
2.2.4	Combustión no premezclada	18
2.3	ESTABILIZACIÓN DE LLAMAS	23
2.4	COMBUSTIÓN EN FLUJOS ROTANTES.....	27
2.4.1	Números característicos para flujos rotantes.....	27
2.4.2	Llamas en flujos rotantes.....	28
2.4.3	Análisis isoterma.....	29
2.4.4	Características del flujo	29
2.4.5	Casos test de referencia.....	31
2.4.6	Mezclado turbulento	34
2.5	ECUACIONES DE CONSERVACIÓN PARA FLUJOS REACTIVOS	35
2.5.1	Conservación de la masa.....	35
2.5.2	Conservación de la cantidad de movimiento.....	35
2.5.3	Conservación de la energía.....	36
2.5.4	Conservación de las especies	36
2.5.5	Ecuación de estado.....	37
2.5.6	Cinética química de las reacciones	37
2.5.7	Ecuación conservación fracción de mezcla	38
2.6	SIMULACIÓN DE LA COMBUSTIÓN	39
2.6.1	Clasificación de los modelos de combustión.....	39
2.6.2	The Laminar Finite-Rate Model	40
2.6.3	Eddy Dissipation (ED).....	40
2.6.4	Eddy Dissipation Concept (EDC).....	41
2.6.5	Eddy Dissipation (ED)/Finite Rate.....	41
2.6.6	Flamelets	42
2.6.7	Análisis estadístico-PDF.....	42
2.7	ANÁLISIS EN EL DOMINIO DE LA FRECUENCIA	45
2.8	CONCLUSIONES	47
2.9	REFERENCIAS	48

3	ANÁLISIS ISOTERMO RANS.....	57
3.1	MODELO NUMÉRICO.....	57
3.1.1	Ecuaciones de conservación.....	57
3.1.2	Turbulencia.....	57
3.1.3	Métodos numéricos.....	72
3.1.4	Geometría.....	78
3.1.5	Condiciones operativas.....	81
3.1.6	Mallado.....	83
3.1.7	Condiciones de contorno.....	85
3.1.8	Casos analizados, hardware y software.....	86
3.2	OPTIMIZACIÓN MODELO NUMÉRICO.....	88
3.2.1	Parámetros de análisis.....	88
3.2.2	Análisis de independencia del mallado.....	92
3.2.3	Modelo de turbulencia.....	96
3.2.4	Esquema discretización.....	102
3.2.5	Acoplamiento presión-velocidad.....	103
3.2.6	RESUMEN DE LOS MODELOS NUMÉRICOS ÓPTIMOS.....	104
3.3	VALIDACIÓN.....	105
3.3.1	Test 1. Palm.....	105
3.3.2	Test 2. Roback-Johnson.....	108
3.4	CONCLUSIONES.....	110
3.5	REFERENCIAS.....	113
4	ANÁLISIS PARAMÉTRICO Y ESTUDIO DEL FLUJO.....	119
4.1	CASOS ANALIZADOS.....	119
4.2	ANÁLISIS PARAMÉTRICO DE LA GEOMETRÍA.....	120
4.2.1	Generador de swirl.....	120
4.2.2	Entrada de aire.....	126
4.2.3	Tamaño de la cámara.....	127
4.3	ESTUDIO DEL FLUJO.....	128
4.3.1	Estructura aerodinámica.....	128
4.3.2	Dimensionamiento de la zona de recirculación interior.....	130
4.4	INFLUENCIA DEL NÚMERO DE SWIRL.....	132
4.5	ANÁLISIS DE MEZCLADO.....	134
4.6	CONCLUSIONES.....	141
4.7	REFERENCIAS.....	143
5	ANÁLISIS ISOTERMO LES.....	147
5.1	INTRODUCCIÓN.....	147
5.2	SIMULACIÓN DE GRANDES REMOLINOS DEL FLUJO EN QUEMADORES ...	147
5.3	METODOLOGÍA.....	148
5.3.1	Simulación de grandes remolinos explícita. Modelo de Smagorinsky ..	150

5.3.2 Simulación de grandes remolinos implícita. Discretización de escalas selectivas.....	151
5.4 MODELO NUMÉRICO	152
5.4.1 Casos analizados	153
5.5 ANÁLISIS DE INDEPENDENCIA DEL MALLADO	154
5.6 OPTIMIZACIÓN DEL CÁLCULO EN PARALELO	155
5.7 ANÁLISIS EXPLÍCITO E IMPLÍCITO.....	158
5.7.1 Análisis explícito. Modelo de Smagorinsky.....	158
5.7.2 Análisis implícito. Scale Selective Discretization. Validación.....	160
5.8 INFLUENCIA DEL NÚMERO DE SWIRL.....	167
5.9 ESTRUCTURAS DE VÓRTICES.....	168
5.10 ESPECTRO DE LA ENERGÍA TURBULENTA.....	171
5.11 PROPER ORTOGONAL DECOMPOSITION (POD).....	173
5.11.1 Metodología	173
5.11.2 POD en quemadores de flujo rotante.....	175
5.12 PRECESSING VORTEX CORE (PVC).....	177
5.13 DIFUSOR EN LA CÁMARA DE ENSAYO.....	180
5.14 EFICIENCIA DE MEZCLADO.....	184
5.14.1 Influencia del número de swirl.....	184
5.14.2 Influencia del difusor.....	185
5.15 CONCLUSIONES	187
5.16 REFERENCIAS.....	189
6 ANÁLISIS REACTIVO.....	195
6.1 INTRODUCCIÓN.....	195
6.1.1 Combustión.....	195
6.1.2 Mezclado y localización de la llama.....	196
6.1.3 Temperatura adiabática de llama	196
6.2 MODELO NUMÉRICO	197
6.2.1 Geometría	197
6.2.2 Condiciones operativas.....	197
6.2.3 Modelo de turbulencia y discretización.....	199
6.2.4 Modelos de combustión	199
6.2.5 Mallado.....	203
6.2.6 Casos analizados, hardware y software.....	205
6.3 ESTUDIO MODELOS DE COMBUSTIÓN.....	205
6.3.1 Temperatura adiabática de llama	212
6.4 PATRÓN DE FLUJO REACTIVO Y ESTRUCTURA DE LA LLAMA	213
6.4.1 Modelo isoterma y reactivo	213
6.4.2 Estructura del flujo reactivo.....	214
6.5 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD AL NÚMERO DE SWIRL, A LA ESTEQUIOMETRÍA Y AL DIFUSOR	225
6.5.1 Influencia del número de swirl	226
6.5.2 Influencia del dosado	232

6.5.3	Influencia del difusor.....	239
6.6	CONCLUSIONES.....	244
6.7	REFERENCIAS.....	247
7	CONCLUSIONES.....	251
7.1	CONCLUSIONES GENERALES.....	251
7.2	CONCLUSIONES DE LA REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	252
7.3	CONCLUSIONES DE LOS MODELOS ISOTERMOS RANS.....	253
7.4	CONCLUSIONES ACERCA DEL ANÁLISIS PARAMÉTRICO Y EL ESTUDIO DEL FLUJO.....	254
7.5	CONCLUSIONES DE LOS MODELOS ISOTERMOS LES.....	255
7.6	CONCLUSIONES SOBRE EL ANÁLISIS REACTIVO	256
7.7	TRABAJOS FUTUROS.....	257

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2-1 Tipos de combustión en función de la configuración del combustible y oxidante.....	12
Figura 2-2 Diagrama de combustión premezclada turbulenta.....	15
Figura 2-3 Estructura de las llamas laminares, arrugadas y en capas delgadas	15
Figura 2-4 Estructura de las Flamelets en remolino y de una reacción distribuida.	15
Figura 2-5 Clasificación de las aplicaciones industriales en un diagrama de Borghi.....	17
Figura 2-6 Diagrama de combustión premezclada turbulenta.....	17
Figura 2-7 Esquema del problema de Burke-Schumann. Llama sobreventilada (der.) y subventilada (izq.).....	19
Figura 2-8 Estructura de una llama laminar de difusión sobreventilada. (Glassman et al. 2008).....	20
Figura 2-9 Variación de la longitud de llama de una llama de difusión en función de la velocidad (Glassman et al. 2008).....	20
Figura 2-10 Diagrama de regímenes de combustión no premezclada por Cuenot and Poinot (Veynante et al. 2002).....	22
Figura 2-11 Diagrama de regímenes de combustión no premezclada.....	22
Figura 2-12 Estabilización de la llama mediante flujo cruzado.....	23
Figura 2-13 Estabilización de la llama mediante pantallas. Quemador de Wolfhard Paker (Norton et al. 1993).....	23
Figura 2-14 Configuraciones de llamas a contracorriente (Glassman et al. 2008 y Tsuji 1982).....	24
Figura 2-15 Estabilización de la llama mediante un obstáculo en el flujo. (Flagan et al. 1988).....	24
Figura 2-16 Esquema de la estabilización de llamas por giro (Flagan et al. 1988).....	25
Figura 2-17 Generador de swirl de un quemador de flujo rotante de 370kW (izq.) y 20 kW (dcha.) (Oystein, 2004)	25
Figura 2-18 Estabilización de la llama mediante alto swirl (izq.) Prototipo de quemador por bajo giro de bajas emisiones (dcha.) (Cheng 2006)	26
Figura 2-19 Estabilización de la llama mediante flujo inverso con punto de remanso (Stagnation Point Reverse Flow Combustor, SPRF)	26
Figura 2-20 Patrón de flujo en función del número de swirl (Roback et al. 1983).....	31
Figura 2-21 Tipos de difusores en cámaras de combustión de turbinas de gas.a) Faired Diffuser b) Dump Diffuser (Klein 1995).....	31
Figura 2-22 Casos test de referencia en flujos rotantes en quemadores (Palm, 2006) ..	32
Figura 2-23 Esquema con las dimensiones más significativas del experimento de Roback y Johnson. (Roback et al. 1983)	33
Figura 2-24 Esquema con las dimensiones más significativas del generador de swirl (Roback et al. 1983).....	33
Figura 2-25 Esquema de la instalación experimental de medida. Palm (2005) y Palm (2006).....	33
Figura 2-26 Ejemplo de una función densidad de probabilidad. (ANSYS, 2012)	44
Figura 2-27 Ejemplo de la función doble delta como función PDF	44

Figura 2-28 Representación visual de la tabla de búsqueda de escalares en el modelo PDF (Ansys, 2012).....	45
Figura 2-29 Visualización del PVC en combustión premezclada en un quemador de flujo rotante (izq.) Representación esquemática del PVC (Syred 2006).....	46
Figura 3-1 Transferencia de energía turbulenta entre las distintas escalas de la turbulencia.....	58
Figura 3-2 Espectro de la energía en función del número de onda.....	59
Figura 3-3 Técnicas de tratamiento de la turbulencia en función de las escalas características de los torbellinos.....	60
Figura 3-4 Metodología de resolución de las ecuaciones con un <i>solver</i> DBCS (ANSYS 2012a):.....	74
Figura 3-5 Metodología de resolución de las ecuaciones con un <i>solver</i> PBS (ANSYS 2012a):.....	75
Figura 3-6 Tratamiento de la pared en Mecánica de Fluidos Computacional. Wall Functions (izq.) y Near-Wall model (dcha.) (ANSYS 2012a).....	77
Figura 3-7 Elementos del modelo	78
Figura 3-8 Dimensiones del quemador de Roback-Johnson.....	79
Figura 3-9 Generadores de swirl de placas planas.....	80
Figura 3-10 Geometría turbinas OWC (Pereiras 2008).....	80
Figura 3-11 Generadores de swirl aletas curvas	80
Figura 3-12 Esquema de los difusores en un quemador de flujo rotante. Difusor de semiángulo 60° (izq.). Difusor de 30° (dcha.)	81
Figura 3-13 Volumen fluido a simular simplificado.....	82
Figura 3-14 Calidad de las celdas en función de <i>equiangle skew</i>	84
Figura 3-15 Detalles de mallado	84
Figura 3-16 Corte del mallado $x=0$ (sup.) Detalle del gradiente de celdas en la dirección axial.	85
Figura 3-17 Número de celdas en función del tamaño característico de mallado.....	85
Figura 3-18 Evolución del número de swirl en dirección axial.....	88
Figura 3-19 Influencia del ángulo de salida de las aletas en el número de swirl para un generador de swirl de placas planas y de placas curvas (correlaciones C1, C2 y C3).....	90
Figura 3-20 Influencia del ángulo de salida de las aletas en el número de swirl para un generador de swirl de placas planas, uno de placas curvas y uno experimental (Durox et al., 2013) según las correlaciones C1, C2, C3, C4, C5 e integración directa.	91
Figura 3-21 Zona de velocidad axial nula. Centro del núcleo del torbellino.	92
Figura 3-22 Número de swirl y tamaño axial de la IRZ en función del número de celdas.....	93
Figura 3-23 Influencia del número de celdas en el tamaño y posición de la zona de recirculación.....	94
Figura 3-24 Perfil de velocidad axial en función del radio y el tamaño de la malla. Secciones axiales 0.01D, 0.2D, 0.4D y 0.8D	95
Figura 3-25 Perfil de velocidad axial (m/s) en función de la posición radial adimensional en $z=0.01D$ para varios modelos de turbulencia. Resultados experimentales (Palm et al. 2005), $S=1.2$	100

Figura 3-26 Influencia de α_s en el perfil de velocidad del modelo k- ϵ RNG swirl dominated.....	101
Figura 3-27 Perfil de velocidad axial en función de la posición radial adimensional en $z=0.042D$ para el modelo de turbulencia k- ϵ RNG swirl dominated. Resultados experimentales Roback et al (1983), $S=0.45$	101
Figura 3-28 Perfil de velocidad axial en función de la posición radial adimensional en $z=0.042D$. Resultados experimentales Roback et al. 1983. $S=0.45$. Esquemas de discretización: First Order Upwind, Second Order Upwind, Power Law, QUICK (Caso M40) y Third Order MUSCL.....	102
Figura 3-29 Perfil de velocidad axial en función de la posición radial adimensional en $z=0.042D$. Resultados experimentales Roback et al. 1983. $S=0.45$. Esquemas de discretización: Standard, PRESTO, Linear, Second order y Body Force Weighted ...	103
Figura 3-30 Validación experimental Test 1. $S=0.6$ Posiciones axiales 0.01D, 0.2D, 0.4D y 0.8D	106
Figura 3-31 Validación experimental Test 1. $S=1.2$ Posiciones axiales 0.01D , 0.2D 0.4D y 0.8D	107
Figura 3-32 Validación experimental Test 2. Velocidad axial en las posiciones axiales 0.042D, 0.42D y 1.25D y en la posición radial $r/D=0$	109
Figura 4-1 Generador de swirl de placas planas (izq.) y aletas curvas (dcha.)	120
Figura 4-2 Influencia del número de swirl en función del ángulo de salida de las aletas	121
Figura 4-3 Influencia del ángulo de salida del número de swirl en el tamaño de la recirculación	122
Figura 4-4 Relación entre el tamaño de la recirculación y el número de swirl	122
Figura 4-5 Casos simulados para el estudio de la influencia del tamaño de la cuerda. 123	
Figura 4-6 Perfiles de velocidad axial en el eje para varias longitudes de aleta. Casos simulados con el 100% (verde), 50% (azul) y 0%(rojo) de la longitud de la parte recta de la aleta.....	123
Figura 4-7 Número de swirl para varias longitudes de aleta	124
Figura 4-8 Número de swirl en función del número de aletas.....	124
Figura 4-9 Influencia del ángulo de salida de las aletas en el número de swirl para un generador de swirl de placas planas y de placas curvas (correlación C1)	125
Figura 4-10 Distribución axial de presión en las caras de succión y de presión de una aleta en la mitad de la cuerda (izq.) y distribución radial de la velocidad tangencial aguas abajo del generador de swirl (dcha.)	126
Figura 4-11 Geometría Roback-Johnson modificada. Detalle de las toberas.....	126
Figura 4-12 Perfil de velocidad axial en el eje para varios tamaños de cámara de ensayo	127
Figura 4-13 Centro de las zonas de recirculación varios tamaños de cámara de ensayo	127
Figura 4-14 Vectores de velocidades y líneas de remanso para un número de Swirl de 1.2 en un quemador de flujo rotante. Simulación RANS con Ansys Fluent.	129

Figura 4-15 Vectores de velocidades para un número de Swirl de 1.2 en un quemador de flujo rotante. Simulación RANS con Ansys Fluent. Visualización de vórtices contrarrotantes.	129
Figura 4-16 Caracterización de la IRZ. Corte transversal.	130
Figura 4-17 Caracterización de la IRZ. Corte transversal para un quemador de flujo rotante. Corte transversal correspondiente a simulación mediante un generador de swirl de aletas curvas (sup.) y de placas planas (inf.) mediante OpenFOAM (mitad superior) y Fluent (mitad inferior).	131
Figura 4-18 Campo de velocidades axiales y líneas de corriente para números de Swirl de 0.3 (izq.), 0.7 (centro) y 1.2 (dcha.) en un quemador de flujo rotante de aletas curvas (29°, 57°, 72°)	133
Figura 4-19 Líneas de corriente proyectadas sobre el plano x=0. Números de Swirl de 0.3 (izq.), 0.7 (centro) y 1.2 (dcha.) en un quemador de flujo rotante de aletas curvas (29°, 57°, 72°)	133
Figura 4-20 Superficies de iso-velocidad nulas para generadores de swirl de placas con ángulo de salida 42° (izq.) y 62° (dcha.). S= 0.55 y 1.15 respectivamente.	133
Figura 4-21 Contornos en el plano longitudinal de la cámara de ensayo de tiempos de residencia (Mitad sup.) y velocidad axial (Mitad inf.) para difusores de 45°, 60°, 75° y 90° (sin dif.)	135
Figura 4-22 Tiempo de residencia a lo largo del eje (izq.) para modelos sin difusor, con un difusor de semiángulo 60° y un difusor de semiángulo 30°. Generador de swirl de placas planas.	136
Figura 4-23 Contornos de gradiente de tiempo de residencia en y (Mitad superior.) y en z (Mitad inferior en el plano x=0 para difusores de 45°, 60°, 75° y 90° (sin difusor).	137
Figura 4-24 Contornos de tiempo de redidencia del fluido para modelos con S=0.3 (inf.), S=0.7 (med.) y S=1.2 (sup.)	138
Figura 4-25 Perfiles axiales de tiempo de residencia del fluido para modelos con S=0.3, S=0.7 y S=1.2	138
Figura 4-26 Contornos en el plano x=0 a) Pasivo Escalar representativo del chorro de la tobera interior b) Varianza total resultante c) Intensidad de Segregación.	140
Figura 4-27 Iso-superficie de intensidad de segregación igual al 3% para aletas curvas (izq.) y placas planas (dcha.) Simulaciones RANS con Fluent.	141
Figura 5-1 Distribución radial de velocidad axial promedio posición axial adimensional = 0.04D Resultados experimentales (Roback et al. 1983)	155
Figura 5-2 Tiempo de ejecución de 10000 pasos temporales de mallas de 7 y 9 millones de celdas usando LES.	157
Figura 5-3 Escalabilidad en función del número de procesadores	157
Figura 5-4 Contornos de velocidad (m/s) y líneas de corriente para flujo instantáneo (sup.) promediado (inf.) OpenFOAM. Swirl=1.1	159
Figura 5-5 Contornos de velocidad axial (m/s). LES (mitad sup.) Swirl=1.1 y RANS (mitad inf.) Swirl=1.2 FLUENT.	160
Figura 5-6 Contorno de velocidad axial y línea de corriente en el corte longitudinal. Flujo instantáneo (sup.) Flujo promedio (inf.)	161

Figura 5-7 Contornos de velocidad media (A y B) de velocidad fluctuante (C y D) y de varianza de la velocidad (E y F) A, C y E corresponden a modelos ILES mientras que B, D y F corresponden a ILES-SSD	162
Figura 5-8 Perfil de velocidad axial promediada para distancias axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 1.23D Resultados experimentales (Roback et al. 1983).....	164
Figura 5-9 Perfil de velocidad radial promediada para distancias axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 1.23D Resultados experimentales (Roback et al. 1983).....	165
Figura 5-10 Perfil de velocidad tangenciales promediada para distancias axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 1.23D Resultados experimentales (Roback et al. 1983).....	166
Figura 5-11 Patrón de flujo promediado en el tiempo para número de swirl 0.6 (sup.) y 1.2 (inf.).....	167
Figura 5-12 Iso-superficies de λ_2 dentro de la cámara de ensayo representando el núcleo de los vórtices. Modelo LES explícito Smagorinsky. Caso L2.....	169
Figura 5-13 Contornos de $\lambda_2 < 0$ (inferior) y $Q > 0$ (superior). Modelo ILES SSD. Caso L7	170
Figura 5-14 Iso-superficies de $Q=30000$ para representar el núcleo de los vórtices. Secciones axiales 0.14D y 0.2D con vorticidad axial desde -120 a 120 s^{-1} . En el exterior se muestran las líneas de corriente. Modelo ILES SSD. Caso L7	170
Figura 5-15 Decaimiento de energía [m^2/s^2] en función del número de onda [m^{-1}] de una sonda a (0.12, 0, 0.16)D. Modelo Smagorinsky OpenFOAM.....	172
Figura 5-16 Decaimiento de energía [m^2/s^2] en función del número de onda [m^{-1}]. Modelo Smagorinsky Ansys Fluent	172
Figura 5-17 POD de velocidades en la sección $z=0.41D$. Distribución energética para cada modo (Arriba, izq.), Modo 0 (Arriba, dcha.), Modos 1-2 (Abajo, izq.) y Modos 3-4 (Abajo, dcha.).....	176
Figura 5-18 POD de velocidades en la sección $z=0.2D$. Vectores de velocidad y contornos de vorticidad axial. Modos 1 a 4.....	176
Figura 5-19 POD de velocidades en la sección $x=0$. Vectores de velocidad y contornos de vorticidad axial. Modos 1 a 4.....	177
Figura 5-20 Visualización del PVC en combustión premezclada en un quemador de flujo rotante (izq.) Representación esquemática del PVC (Syred 2006).	177
Figura 5-21 Campo de velocidades instantáneas de las secciones transversales 0.04D (izq.) y 0.4D (dcha.) Contornos de velocidad axial y vectores de velocidad.....	178
Figura 5-22 Campo de velocidades instantáneas de la sección transversal 1.22D. Los contornos se corresponden con la velocidad axial y vectores de velocidad.	179
Figura 5-23 Diferentes posiciones de iso velocidad instantánea azimutal igual a cero en la sección transversal $Z = 1.22D$ m.	179
Figura 5-24 Contornos de velocidad axial promediada en el tiempo para números de swirl 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 60°, 80° y 90° (sin difusor).....	182
Figura 5-25 Perfiles de velocidad axial en el eje promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 45°, 60°, 70°, 80° y 90° (sin difusor).	182

Figura 5-26 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para números de swirl 1.2 (izq.) y 0.6 (dcha.) para difusores de semiángulo 30°, 45°, 60°, 70°, 80° y 90° (sin difusor) para posiciones axiales adimensionales de 0.04D, 0.2D y 0.82D.	183
Figura 5-27 Contornos de escalar pasivo para números de swirl de 0.6 (sup.) y 1.2 (inf). Sin difusor.	184
Figura 5-28 Escalar pasivo y líneas de corriente medias en la sección axial en $z=0.2D$, $S=1.2$ y $S=0.6$	185
Figura 5-29 Perfiles de escalar pasivos promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 45°, 60°, 70°, 80° y 90° (sin difusor)	185
Figura 5-30 Contornos de escalar pasivo promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 60°, 80° y 90° (sin difusor).....	186
Figura 6-1 Temperatura en función de la fracción de mezcla para varias ganancias (HG) y pérdidas de calor (HL). Modelo PDF. $S=1.1$	202
Figura 6-2 Temperatura y mallado. Malla hexaédrica 2.3 millones (izq.), malla hexaédrica 0.6 millones (centro) y Malla tetraédrica 1.6 millones (dcha.).....	204
Figura 6-3 Perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para dos mallas hexaédricas y una tetraédrica para posiciones axiales de 0.04D (sup.) y 0.2D (inf.).....	204
Figura 6-4 Contornos de velocidad axial (m/s) para los casos isoterma, sin reacción, ED, EDC de una reacción, PDF (de izquierda a derecha).	206
Figura 6-5 Contornos temperatura (K) para los casos sin reacción, ED, EDC con una reacción, EDC con dos reacciones, EDC con cuatro reacciones y PDF (de izquierda a derecha).	206
Figura 6-6 Isolíneas de velocidad axial nula para los modelos de combustión ED, EDC, PDF sin reacción e isoterma $S=1.1$	208
Figura 6-7 Temperatura en función de la posición axial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y sin reacción. $S=1.1$	208
Figura 6-8 Velocidad axial en función de la posición axial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF sin reacción e isoterma $S=1.1$	209
Figura 6-9 Velocidad axial en función de la posición radial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y los casos isotermos y sin reacción. $S=1.1$. Sección axiales 0.04D, 0.2D y 0.82D.	210
Figura 6-10 Temperatura en función de la posición radial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y sin reacción. $S=1.1$. Sección axiales 0.04D, 0.2D y 0.82D.	211
Figura 6-11 Temperatura en función de la fracción másica de metano para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y sin reacción. $S=1.1$	213
Figura 6-12 Velocidad axial y líneas de corriente proyectadas sobre una sección axial para casos reactivos (izq.) e isotermos (dcha.).....	214
Figura 6-13 Vectores de velocidad proyectados sobre una sección longitudinal (izq.) y contornos de temperatura sobre una sección longitudinal del quemador e iso-	

superficies de velocidad axial nula coloreadas por temperatura (rango 300-1900°C) (dcha.).....	214
Figura 6-14 Temperatura (K) (izq.), velocidad (m/s) (centro) y velocidad axial (m/s) (dcha.). Modelo PDF. S=1.1.....	215
Figura 6-15 Energía cinética turbulenta (m^2/s^2) (izq.), y varianza fracción mezcla (-) (dcha.). Modelo PDF. S=1.1.....	216
Figura 6-16 Iso-superficies de temperatura constante sobre líneas de corriente	216
Figura 6-17 Iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constante sobre líneas de corriente	217
Figura 6-18 Iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constantes en función de la posición axial y radial adimensionales	218
Figura 6-19 Contornos de fracción másica de O_2 (izq.) y de H_2O (dcha.). Modelo PDF. S=1.1	219
Figura 6-20 Contornos de fracción másica de NO_2 (-) (izq.) y de NO (centro) y N_2O . Modelo PDF. S=1.1.....	219
Figura 6-21 Contornos de fracción másica de CH_4 (izq.) CO_2 (centro) y de CO (dcha.). Modelo PDF. S=1.1.....	220
Figura 6-22 Perfiles de temperatura en función de la posición radial para varias secciones axiales. Modelo PDF. S=1.1.....	221
Figura 6-23 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial para varias secciones axiales. Modelo PDF. S=1.1.....	222
Figura 6-24 Perfiles de velocidad (eje primario) y temperatura (eje secundario) en función de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1.....	223
Figura 6-25 Perfiles de presión estática y energía cinética turbulenta (eje primario) y tasa de disipación turbulenta (eje secundario) en función de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1.....	223
Figura 6-26 Perfiles de media de la fracción de mezcla (eje primario) y varianza de la fracción de mezcla (eje secundario) en función de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1	224
Figura 6-27 Perfiles de fracción másica de CH_4 , CO_2 , H_2O , N_2 y O_2 en función de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1.....	224
Figura 6-28 Perfiles de fracciones másicas de CO y NO de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1.....	224
Figura 6-29 Contornos de temperatura para número de swirl de 0.2 (izq.), 0.6 (centro) y 1.1 (dcha.) Zona cercana a la expansión brusca. Configuración no premezclada.....	227
Figura 6-30 Imágenes de llamas con números de swirl bajos (izq.) ($S_{medio} = 0.25$), medios (centro) ($S_{medio} = 0.5$) y altos (dcha.) $S_{medio} = 0.95$. Resultados experimentales de Durox et al., 2013. Configuración premezclada.....	227
Figura 6-31 Contornos de temperatura para número de swirl de 0.2 (sup.), 0.6 (centro) y 1.1 (inf.) Longitud completa de la cámara.	227
Figura 6-32 Contornos de velocidad para bajo número de swirl (0.2) (izq.), medio (0.6) (centro) y alto (1.1) (dcha.).....	228
Figura 6-33 Perfiles de temperatura axial en función de la posición axial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1	229

Figura 6-34 Perfiles de velocidad axial en función de la posición axial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1.....	229
Figura 6-35 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1 para posiciones axiales 0.04D, 0.41D y 0.82D	230
Figura 6-36 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1 para posiciones axiales 0.04D, 0.41D y 0.82D	231
Figura 6-37 Contornos de temperatura para $\Phi_r = 0.75$ (izq.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (dcha.).....	232
Figura 6-38 Contornos de velocidad para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.).....	232
Figura 6-38 Temperatura de salida en función del dosado relativo. Modelo ED. Análisis de sensibilidad del dosado modificando la fracción másica de combustible a la entrada	234
Figura 6-39 Temperatura de salida en función del dosado relativo. Modelo ED. Análisis de sensibilidad del dosado modificando la velocidad de entrada del combustible.....	234
Figura 6-41 Contornos de fracción másica de metano para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)	235
Figura 6-42 Contornos de fracción másica de CO para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)	235
Figura 6-43 Contornos de fracción másica de O ₂ para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)	236
Figura 6-44 Perfiles de temperatura en función de la posición axial para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)	237
Figura 6-45 Perfiles de velocidad axial en función de la posición axial adimensional para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)	237
Figura 6-46 Perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.).....	238
Figura 6-47 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.).....	238
Figura 6-48 Contornos de temperatura (K) para S=1.1 casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°)(inf.).....	240
Figura 6-49 Contornos de velocidad (m/s) para S=1.1 casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)	240
Figura 6-50 Perfiles de temperatura en función de la posición axial adimensional para S=1.1 casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)	241
Figura 6-51 Perfiles de temperatura en función de la posición axial adimensional para S=1.1 casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)	241
Figura 6-52 Perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para S=1.1 casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°)(inf.) para posiciones axiales 0.04D, 0.2D y 0.82D	242

Figura 6-53 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.) para posiciones axiales $0.04D$, $0.2D$ y $0.82D$ 243

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2-1 Dimensiones de los casos test utilizados para validar (mm)	34
Tabla 2-2 Clasificación de los modelos de combustión.....	40
Tabla 3-1 Características de las escalas de la turbulencia.....	58
Tabla 3-2 Características de las técnicas de tratamiento de la turbulencia (Eggenpieler, 2012).....	61
Tabla 3-3 Modelos de turbulencia más comunes.....	70
Tabla 3-4 Códigos de dinámica de fluidos computacional.....	73
Tabla 3-5 Algoritmos de acoplamiento presión-velocidad.....	75
Tabla 3-6 Esquemas de discretización disponibles en <i>Ansys Fluent</i> para <i>PBS</i>	76
Tabla 3-7 Modelos de pared	78
Tabla 3-8 Condiciones operativas	81
Tabla 3-9 Condiciones de contorno de velocidad de entrada y salida de flujo	86
Tabla 3-10 Condiciones de contorno de pared.....	86
Tabla 3-11 Modelos numéricos simulados	87
Tabla 3-12 Número de swirl de generadores de rotación de placas planas y curvas según las correlaciones C1, C2 y C3.	89
Tabla 3-13 Número de swirl de generadores de rotación experimental (Durox et al. 2013), de placas planas y de aletas curvas según las correlaciones C1, C2 y C3.....	90
Tabla 3-14 Simulaciones realizadas sobre la influencia de la malla	93
Tabla 3-15 Modelos de turbulencia simulados.....	97
Tabla 3-16 Modelos de turbulencia simulados. Caso unidimensional.....	98
Tabla 3-17 Resumen de las características del modelo numérico.....	104
Tabla 3-18 Modelo numérico de OpenFOAM.....	104
Tabla 3-19 Modelos analizados para la validación.....	105
Tabla 3-20 Error relativo de la velocidad máxima. (Caso test 1).....	108
Tabla 3-21 Error relativo del tamaño radial de la IRZ. (Caso test 1)	108
Tabla 3-22 Error relativo de la velocidad máxima. (Caso test 2).....	110
Tabla 3-23 Error relativo de la longitud axial de la IRZ. (Caso test 2).....	110
Tabla 4-1 Modelos geométricos simulados	120
Tabla 4-2 Número de aletas simuladas.....	124
Tabla 4-3 Longitudes características de la IRZ.....	131
Tabla 5-1 Detalles del modelo numérico con simulación de grandes torbellinos.....	153
Tabla 5-2 Casos analizados mediante Large Eddy Simulations.....	154
Tabla 5-3 Comparación de las dos mallas empleadas	155
Tabla 5-4 Tiempos de simulación hasta 10000 pasos temporales.....	157
Tabla 5-5 Métodos para detectar los vórtices.....	168
Tabla 6-1 Condiciones operativas	198
Tabla 6-2 Dosado y propiedades de la mezcla.....	198
Tabla 6-3 Parámetros de un mecanismo de una reacción (Westbrook, 1981)	200
Tabla 6-4 Parámetros de un mecanismo de dos reacciones BFER's o 2S CH4 BFER (Franzelli, 2012)	200

Tabla 6-5 Parámetros de un mecanismo de cuatro reacciones Jones y Linstedt, 1987.	200
Tabla 6-6 Coeficientes de la polinomial del C_p para cada componente de la reacción	202
Tabla 6-7 Modelos geométricos y numéricos simulados	205
Tabla 6-8 Localización de la llama según varios criterios	225

ACRÓNIMOS

AMG	Algebraic multigrid methods
CERFACS	Centre européen de recherche et de formation avancée en calcul scientifique
CFD	Computational fluid dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CPU	Central processor unit
DBCS	Density bases coupled solver
DES	Detached eddy simulations
DNS	Direct numerical simulation
ED	Eddy dissipation
EDC	Eddy dissipation concept
EDM	Eddy dissipation model
ENO	Essentially non-oscillatory methods
EVM	Eddy viscosity models
EWT	Enhanced wall treatment
FCT	Flux corrected transport
FDM	Finite difference method
FEM	Finite element method
FFT	Fast Fourier transform
FVM	Finite volume method
HG	Heat gain
HL	Heat loss
HPC	High performance computing
i-LES	Implicit large eddy simulations
IRZ	Inner recirculation zone
LES	Large eddy simulations
LFA	Steady laminar flamelet assumption,
LIF	Laser induced fluorescence
LV	Laser velocimeter
MUSCL	Monotonic upstream-centered scheme for conservation laws
NASA	National aeronautics and space administration
ORZ	Outer recirculation zone
OWC	Oscillating water column
PBS	Pressure based solver
PDA	Phase doppler anemometry
PDF	Probability density function
PISO	Pressure-implicit with splitting of operators
PIV	Particle image velocimetry
POD	Proper orthogonal decomposition
PRACE	Partnership for advanced computing in Europe
PRESTO	Pressure staggering option
PVC	Precessing vortex core
QUICK	Quadratic upstream interpolation for convective kinematics

RAM	Random access memory
RANS	Reynolds averaged Navier Stokes
RES	Red española de supercomputación
RNG	Re-normalisation group
RSM	Reynolds stress model
RTD	Residence time distribution
SAS	Scale adaptive simulation
SGS	Sub-grid stress
SIMPLEC	Simple-consistent
SPRF	Stagnation point reverse flow combustor
SRS	Scale-resolving simulation
SSD	Scale selective discretization
SST	Shear stress transport
SWF	Standard wall function
TVD	Total-variation-diminishing
UDF	User defined function

SÍMBOLOS GRIEGOS

α	Difusividad térmica, parámetro de la función de probabilidad β , semiángulo del difusor de un quemador de flujo rotante, ángulo de salida de las aletas del generador de swirl
α_s	Constante de swirl o rotación del modelo RNG Swirl Modification
β	Exponente de temperatura de la ecuación de Arrhenius, parámetro de la función de probabilidad BETA, constante de integración del espectro de energía
δ_i	Espesor de la llama premezclada laminar
δ_{ij}	Delta de kronecker
δ_L	Grosor de llama premezclada laminar
ϵ	Disipación de energía cinética turbulenta, error calculado mediante la extrapolación de Richardson
η	Longitud característica basado en la microescala
θ_a	Variable en un mallado grueso
θ_b	Variable en un mallado fino
θ_i	Escalar instantáneo
κ	Número onda, constante de von Karman
λ_m	Valores propios del modo m
λ_2	Valores negativos del segundo valor propio intermedio del tensor $S^2 + \Omega^2$
μ	Viscosidad dinámica
μ_{SGS}	Viscosidad de subgrid stress
μ_T	Viscosidad turbulenta
ν	Viscosidad cinemática
ξ	Fracción de mezcla
ξ^*	Longitud de las fine scales
$\bar{\xi}$	Fracción de mezcla media
$\bar{\xi}^2$	Varianza de la fracción de mezcla
ρ	Densidad
ρ_{an}	Densidad del fluido que entra por la tobera exterior
ρ_{en}	Densidad del fluido que entra por la tobera interior
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
σ_j^2	Varianza de la concentración de la etapa j
σ_t	Constantes de la ecuación de conservación de la fracción de mezcla
$\sigma_{v\theta}$	Varianza de la velocidad tangencial
σ_Y^2	Varianza de la concentración total
τ	Tiempo característico basado en las escalas intermedias, tiempo característico de una llama premezclada laminar
τ'	Tensor de esfuerzos viscosos
τ^*	Escala de tiempos de las <i>fine scales</i>
$\bar{\tau}_{ij}^{sgs}$	Subgrid stress tensor o tensor de esfuerzos de la submalla
τ_c	Tiempo característico de la cinética química
τ_i	Fracción del tiempo que el fluido pasa en el estado ξ
τ_t	Tiempo característico de mezclado

τ_w	Esfuerzo cortante sobre la pared
τ_η	Tiempo característico de la escala de Kolmogorov
ϕ_m	Modo m
ψ	Tiempo de residencia
Ω	Número de turbulencia característica del modelo RNG Swirl Modification
Ω_{ij}	Tensor de velocidades de rotación
Φ	Dosado
$\Phi_{\text{esteq.}}$	Dosado estequiométrico
Φ_r	Dosado relativo

SÍMBOLOS LATINOS

A	Constante empírica modelo ED
A_{an}	Área de entrada de la tobera exterior
A_{cn}	Área de entrada de la tobera interior
A_i	Elemento químico i
A_r	Factor preexponencial
a	Velocidad del sonido
B	Constante empírica modelo ED
B_0	Número de Boltzmann
C	Constante de integración del espectro de energía
C_d	Constantes de la ecuación de conservación de la fracción de mezcla
C_g	Constantes de la ecuación de conservación de la fracción de mezcla
$C_{i,r}$	Concentración molar de la especie i en la reacción r
c_i	Constante de integración del espectro de energía
$c_m(t)$	Coefficiente de amplitud del modo m
c_p	Capacidad calorífica a presión constante
c_s	Coefficiente de Smagorinsky
c_η	Constante de integración del espectro de energía
c_μ	Constante de cálculo de la disipación de la energía cinética turbulenta
d	Diámetro de la tobera exterior
d_s	Diámetro exterior del generador de swirl
D	Diámetro de la cámara de combustión
Da	Número de Damköhler
Da_{EXT}	Damköhler extinction
Da_{LFA}	Damköhler steady laminar flamelet assumption
D_{CRZ}	Distancia radial entre vórtices de la IRZ
d_h	Diámetro interior del generador de swirl
D_i	Difusividad másica de la especie i
D_{IRZ}	Diámetro de la IRZ
D_m	Difusividad másica
d_m	Diámetro medio de la tobera exterior
$D\sigma_1^2$	Destrucción de la varianza para el subrango inercial-convectivo
D_ψ	Coefficiente de transporte difusivo de la ecuación de conservación de la edad del fluido
E	Constante de integración que depende de la rugosidad de la pared
$E(\kappa)$	Espectro de energía cinética turbulenta
E_r	Energía de activación
f	Frecuencia de desprendimiento de vórtices
f_u	Función de pared de amortiguación de van Driest's
f_L	Correlación experimental función de la macroescala
f_m	Fuerzas másicas
Fr	Número de Froude
f_η	Correlación experimental función de la microescala
g	Constante de gravitación universal
$G\sigma_1^2$	Generación de la varianza para subrango inercial-convectivo

h	Altura
I	Tensor identidad
I_Y	Intensidad de segregación
J_h	Flujo difusivo de calor
k	Conductividad térmica, energía cinética turbulenta
Ka	Número de Karlovitz
k_m	Fracción de energía representada por el modo ϕ_m
k_r^B	Constante de reacción inversa
k_r^E	Constante de equilibrio de la reacción
k_r^F	Constante de reacción directa
L	Longitud característica, longitud de la cámara de combustión
l	Longitud característica basado en las escalas intermedias
l_0	Longitud característica de la macroescala
Le	Número de Lewis
L_{IRZ}	Tamaño axial de la IRZ
l_η	Longitud característica de la escala de Kolmogorov
Ma	Número de Mach
M_i	Peso molecular de la especie i
P	Presión
p	Orden del esquema de discretización
$P(\xi)$	Probabilidad de la fracción de mezcla
p_0	Constante de integración del espectro de energía
Pr	Número de Prandtl
Q	Segunda invariante del tensor de gradiente de velocidad.
Q_{an}	Caudal de la tobera exterior
Q_{cn}	Caudal de la tobera interior
Q_q	Calor generado por reacción química
Q_r	Intercambio de calor por radiación
R	Constante universal de los gases
r	Longitud característica de la escala integral, posición radial
r_m	Relación existente entre el tamaño de la malla fina y la gruesa
R_a	Radio interior de la tobera exterior
Re_c	Número de Reynolds crítico
Re_η	Número de Reynolds basado en la microescala
Re_L	Número de Reynolds basado en la macroescala
Re_l	Número de Reynolds basado en las escalas intermedias
R_g	Constante específica de un gas
R_i	Número de Richardson
R_{i1}	Radio interior de la tobera interior
R_{i2}	Radio exterior de la tobera interior
R_m	Radio medio de la tobera exterior
R_o	Radio de la cámara de combustión
S	Número de swirl
Sc	Número de Schmidt
S_c	Número de swirl crítico

S_{ij}	Tensor de velocidades de deformación medias
s_L	Velocidad de llama premezclada laminar
S_s	Distancia de la salida de las aletas del generador de swirl a la entrada de la cámara de combustión
T	Temperatura, tiempo característico basado en la macroescala
t_m	Tiempo de mezclado de Corrsin
u	Energía interna, velocidad característica basado en las escalas intermedias
U	Promedio de velocidad
u'	Fluctuación de la velocidad en la macroescala
u_0	Velocidad característica basada en la macroescala
u_η	Velocidad característica basada en la microescala
u_L	Velocidad del flujo relativa a la escala L
u_η	Velocidad característica de la escala de Kolmogorov
v	Velocidad
v_{an}	Velocidad de la tobera exterior
v_{cn}	Velocidad de la tobera interior
v_f	Velocidad media en la cámara de combustión
$v_{i,r}'$	Coefficiente estequiométrico del reactivo i en la reacción r
$v_{i,r}''$	Coefficiente estequiométrico del producto i en la reacción r
v_i'	Fluctuación de una componente de velocidad
v_{iM}	POD de v_i' en M modos
v_z	Velocidad axial
v_θ	Velocidad tangencial
w_i	Generación o destrucción molar de la especie i.
$\dot{w}_{i,r}$	Velocidad de reacción de la especie i en la reacción r
$y_{comb.}$	Fracción másica de combustible que entra por la tobera interior
X_{CRZ}	Localización axial de los vórtices de la IRZ
Y	Escalar pasivo de micromezcla
y^+	Distancia adimensionalizada desde la pared
y_{med}^+	Distancia media adimensionalizada desde la pared
y_{min}^+	Distancia mínima adimensionalizada desde la pared
Y_i	Fracción másica de la especie i
Y_i^*	Fracción másica de las fines scales de la especie i
z	Posición axial
Z_i	Variabes Schwab-Zeldovich para la fracción de mezcla

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1	INTRODUCCIÓN	3
1.1	PRESENTACIÓN	3
1.2	JUSTIFICACIÓN.....	4
1.3	ANTECEDENTES.....	5
1.4	OBJETIVOS	6
1.5	CONTENIDOS DE LA MEMORIA	6
1.6	REFERENCIAS	7

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Presentación

Esta memoria recoge los aspectos más importantes de las investigaciones realizadas acerca de la aerodinámica, la turbulencia y la combustión no premezclada en quemadores de gas de flujo rotante o quemadores estabilizados por giro.

La combustión no premezclada en flujos turbulentos, es una de las configuraciones más empleadas por su seguridad. En la actualidad no existe una metodología aceptada ni para la simulación, ni para la validación, lo que pone de manifiesto el carácter innovador de este trabajo.

Esta tesis, la primera dentro de la línea de investigación en quemadores de flujo rotante del grupo de mecánica de fluidos de la Universidad de Valladolid, busca establecer las bases y la metodología de trabajos futuros en el modelado numérico, isoterma o reactivo, mediante RANS o LES, de la interacción de dos chorros coaxiales en un quemador de flujo rotante. El propósito es minimizar las emisiones de NO_x y el consumo de combustible por lo que, se va a caracterizar con detalle la estructura del flujo y de la llama en estos quemadores.

Para ello han sido desarrollados modelos numéricos isotermos y reactivos mediante un código libre (OpenFOAM) y uno comercial (Ansys Fluent) de un quemador de flujo rotante. Los modelos numéricos se han validado mediante la comparativa de los resultados numéricos obtenidos frente a los experimentales de bibliografía de referencia.

Las aportaciones innovadoras de la tesis se pueden encuadrar, conceptualmente, en tres grandes fases:

- La primera, consiste en el desarrollo de un modelo de simulación isoterma, robusto y validado así como el análisis de la aerodinámica y turbulencia de un quemador de flujo rotante, aplicando las tradicionales técnicas RANS (capítulo 3).

Mediante dicho modelo, se diseñan y optimizan dos generadores de swirl, se caracteriza la estructura del flujo con detalle y se analiza el mezclado desde el punto de la macromezcla y micromezcla. Además se estudia el efecto en el flujo de la inclusión de un difusor y del número de swirl (capítulo 4).

- La segunda fase, trata de la modelización transitoria isoterma mediante simulaciones de grandes torbellinos (LES). Se emplean técnicas numéricas novedosas como la discretización de escalas selectivas (SSD) en conjunto con modelos implícitos (ILES). Estas técnicas permiten estudiar el flujo con un mayor detalle, a la vez que ayudan a la caracterización del espectro de energía y de los vórtices. La gran cantidad de información de los modelos LES es postprocesada para aplicar el análisis POD lo que permite reducir los datos necesarios para extraer las principales características del flujo y estructuras coherentes como el PVC (capítulo 5).

- La última fase consiste en el desarrollo de modelos de combustión y la aplicación de éstos para el estudio del patrón de flujo reactivo y la estructura de la llama. Además, con el modelo desarrollado se realizan análisis de sensibilidad con el dosado, el número de swirl o la implementación de un difusor (capítulo 6).

Los resultados de la primera fase de la investigación (Capítulos 3 y 4), se han materializado en la publicación indexada del JCR: Teresa Parra-Santos, J.R. Pérez-Domínguez, R.Z. Szasz, F. Castro-Ruiz, (2015) "An isothermal analysis of curved-vane and flat-vane swirlers for burners", *Engineering Computations*, Vol. 32 Iss: 3, pp.668 – 686.

Este capítulo presenta una justificación del interés y la necesidad de disponer de estudios de este tipo. Además muestra los antecedentes de las otras líneas de investigación relacionadas en el departamento. Por último se detallan brevemente los contenidos de esta memoria.

1.2 Justificación

La energía eléctrica es vital para el desarrollo industrial y social de todos los países. La combustión es un proceso fundamental en la obtención de energía eléctrica cuya demanda es cada vez más fuerte. A pesar de la introducción de nuevas fuentes de energía renovables, la combustión sigue siendo la fuente principal de energía en el mundo, ya que el consumo de energía procedente de combustibles fósiles es de aproximadamente el 80% del total. Un grave problema acuciante de nuestra sociedad es la contaminación generada por los procesos de combustión.

La generación de CO, hollín, inquemados en turbinas de gas no es un problema significativo con la tecnología actual, debido a que se tienen rendimientos de combustión cercanos a la combustión completa. Sin embargo la estabilización de la llama y la minimización de los óxidos de nitrógeno (NO_x) son el principal reto de la combustión en turbinas de gas en la actualidad. Además la normativa de emisiones impone límites cada vez más bajos por lo que existe una clara necesidad de trabajar en esta línea de investigación.

Existen métodos de tratamiento de los NO_x generados, pero a medio y largo plazo la mejor opción es actuar sobre el diseño y minimizar las emisiones.

Las tendencias actuales pasan por quemar un dosado muy pobre, debido a que si se trabaja cerca del límite de inflamabilidad se podrá reducir la temperatura de la llama produciendo baja generación de NO_x y además ahorrar combustible. Por otro lado, al operar cerca del límite de inflamabilidad con altas velocidades (la sección de paso suele ser pequeña) se tiene que la combustión es muy sensible a inestabilidades termoacústicas, por lo que mínimas perturbaciones pueden llegar a extinguir la llama.

Los quemadores de flujo rotante juegan un papel fundamental en la industria, como se indica en Joos (1998) y Valera-Medina (2012). Se han desarrollado en los últimos 40 años y presentan el complejo fenómeno de rotura del vórtice o *vortex*

breakdown que tiene lugar en flujos rotantes según O Lucca-Negro (2001). Este fenómeno estabiliza la combustión en las condiciones presentadas anteriormente. El uso de estos quemadores permite disminuir las emisiones, el consumo de combustible, generar poca pérdida de carga, hollín y menos tareas de mantenimiento.

Un quemador de flujo rotante se compone de dos toberas coaxiales. Por la tobera interior circula un chorro de combustible, con cantidad de movimiento axial y por la tobera exterior circula aire con una importante componente azimutal en la que los torbellinos de la zona de recirculación estabilizan la llama. Este quemador, pese su simpleza geométrica, muestra un patrón de flujo muy complejo, por lo que para su estudio se necesitan herramientas avanzadas como la simulación de dinámica de fluidos computacional.

Así pues la necesidad de tener un estudio numérico completo sobre la estructura del flujo y la combustión en este tipo de quemadores para minimizar las emisiones es clara.

1.3 Antecedentes

Este trabajo se enmarca dentro de la línea de investigación sobre flujos reactivos del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Valladolid.

En trabajos anteriores se ha analizado el mezclado de chorros coaxiales sin rotación mediante micromezcla y macromezcla. En el proyecto de investigación regional de la Junta de Castilla y León (ref. VA028A08), se analizó la propagación de llamas laminares sometidas a fuerzas centrífugas. En este proyecto se propuso un modelo teórico de la evolución del núcleo de llama al propagarse en un vórtice forzado. Esta investigación se llevó a cabo con la colaboración de la Universidad de Chalmers (Suecia) y Lodz (Polonia). En un proyecto nacional (ref. TRA2004-06739-C04-03) se propuso una metodología para estimar las emisiones de NO_x usando un mecanismo de reacción GRI-MECH y un modelo cero-dimensional en base a las presiones y temperaturas locales. Esta investigación fue fruto de una colaboración con la Universidad de California (USA).

La presente tesis se desarrolla bajo el proyecto de investigación fundamental no orientada sobre la caracterización aerodinámica de flujos rotantes en quemadores del Ministerio de Economía y Competitividad (ref. ENE2011-25468). Ha sido realizada en participación con la Universidad de Lodz (Polonia) y la Universidad de Lund (Suecia), con amplia experiencia en el modelado de flujos turbulentos y extinción de llamas.

Se ha dispuesto de acceso a clústeres de supercomputación gracias a los proyectos “Mixing features of swirling flows in combustors” (ref. FI-2013-1-0001) y “Aerodynamic characterization of swirling flows in combustors” (ref. 228398) financiados por RES (Red Española de Supercomputación) y PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) respectivamente. Los análisis LES con código libre (OpenFOAM) han sido simulados en dichos clústeres de supercomputación.

1.4 Objetivos

Los objetivos fundamentales de la tesis son caracterizar cuantitativa y cualitativamente, la estructura del flujo en un quemador de flujo rotante, tanto desde el punto de vista isoterma como reactivo. También se pretende identificar las tendencias más importantes del flujo en función del número de swirl.

Una revisión previa es necesaria sobre los aspectos más significativos, así como las técnicas o herramientas actuales para la simulación de la combustión no premezclada en flujos con rotación con alto número de Damköhler, para establecer la metodología futura en el estudio de llamas turbulentas no premezcladas.

Los objetivos principales se pueden satisfacer a través del desarrollo y la optimización de modelos CFD, que van a ser validados con casos de bibliografía de referencia. Sería interesante aprovechar los modelos anteriores para diseñar varios generadores de swirl, estudiar posibles modificaciones geométricas como la inclusión de un difusor o evaluar la influencia de parámetros de operación. Además se pretende caracterizar el mezclado a través de la evaluación de la macromezcla y de la micromezcla.

Una caracterización completa del flujo no es posible con técnicas RANS, por lo que se persigue aplicar las novedosas técnicas de simulación de grandes remolinos (LES) en consonancia con nuevos algoritmos numéricos, para poder estudiar las estructuras de vórtices, el espectro de energía del flujo o fenómenos como el PVC.

El objetivo final es la evaluación de la capacidad de simular llamas turbulentas no premezcladas con un código CFD. Se emplean un código libre (OpenFOAM) y uno comercial (Ansys Fluent).

Para completar los objetivos principales, el desarrollo de un modelo de combustión robusto, validado y eficiente, en términos computacionales, es vital. Se busca establecer las diferencias entre el flujo isoterma o reactivo, así como evaluar el impacto en éste del número de swirl, el dosado o la implementación de un difusor.

1.5 Contenidos de la memoria

A continuación se presenta un breve resumen de la estructura y contenidos de la tesis:

- En el capítulo 1 se muestran una breve introducción, los antecedentes, la justificación, los objetivos y el contenido de la memoria.
- En el capítulo 2 se realiza una revisión de los aspectos más importantes de combustión y análisis de flujos reactivos. Se trata principalmente combustión no premezclada, estabilización de la llama y flujos rotantes. Además se presentan las técnicas o herramientas actuales para la simulación CFD de la combustión.
- El capítulo 3 consiste en un análisis isoterma del flujo en este tipo de quemadores mediante técnicas RANS. Se describe de forma completa el

modelo de simulación para caracterizar la aerodinámica del flujo dando importancia al tratamiento de la turbulencia. Los modelos empleados se optimizan y se validan frente a los casos experimentales de Palm et al. (2005) y Roback et al. (1983).

- En el capítulo 4 se resumen todos los análisis paramétricos realizados y se presenta un estudio detallado del flujo isoterma. Se realizan dos diseños del generador de swirl (placas planas y aletas curvas), mediante el estudio de influencia en el flujo del ángulo de salida de las aletas, su longitud y el número de éstas. Además se analiza el efecto que produce en el flujo la disposición de entradas de aire radiales, cámaras de combustión de diferente tamaño o diferentes difusores. Por último se caracterizan las zonas de recirculación y se realiza un análisis del mezclado, tanto desde el punto de vista de la macromezcla como de la micromezcla.
- El capítulo 5 se basa en un análisis isoterma transitorio del quemador mediante el modelo LES. Se describen las principales características y metodología del modelo LES con los tratamientos explícito e implícito y se muestran los modelos empleados. Se describe brevemente el flujo y las estructuras de vórtices más características, así como el espectro de energía obtenido. Por último el postprocesado de la gran cantidad de datos de los modelos permite realizar un análisis POD y describir el Precessing Vortex Core o PVC.
- En el capítulo 6, una vez desarrollado un modelo isoterma óptimo, se analizará y describirá el flujo reactivo considerando los principales modelos de combustión. Se comparan el modelo Eddy Dissipation, en el que la combustión viene determinada por el mezclado, el modelo Eddy Dissipation Concept, que combina el anterior con mecanismos de reacción semidetallados y el modelo Probability Density Function que se basa en fundamentos estadísticos. Se comparan dichos modelos de combustión con los resultados de temperatura adiabática de llama obtenidos con el mecanismo de reacción GRI-Mech 3.0. Con el modelo óptimo se describe el patrón de flujo reactivo y la estructura de la llama. Por último, se estudia la influencia del número de swirl, de la geometría del difusor y de la estequiometría de la mezcla.
- En el capítulo 7 se resumen las conclusiones más importantes y se plantean trabajos futuros para ampliar la línea de investigación.

1.6 Referencias

- [1]. Joos, F., Brunner, P., Schulte-Werning, B., Syed, K. and Eroglu, A. (1998). Desarrollo del sistema de combustión secuencial para la familia de turbinas a gas GT24/GT26. Revista ABB Zurich: ABB Corporate Management Services AG, no. 4 pp. 4-16.

- [2]. Valera-Medina, A., Syred, N. and Griffiths, A. (2012). Analysis of the Impact Caused by Coherent Structures in Swirling Flow Combustion Systems. *Ing. invest. y tecnol*, vol.13, n.2, pp.199-213. ISSN 1405-7743.
- [3]. Lucca-Negro, O. and O'Doherty, T. (2001). Vortex breakdown: a review. Cardiff School of Engineering, Cardiff University, *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 27, no. 4, Pages 431–481.
- [4]. Palm, R., Grundmann, S., Jakirlic, S., and Tropea, C. (2005). Experimental investigations and modelling of flow and turbulence in a swirl combustor. *Proc. of 4th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, Williamsburg, VA, USA.
- [5]. Roback, R. and Johnson, B.V. (1983). Mass and Momentum Turbulent Transport Experiments with Confined Swirling Coaxial Jets. NASA Technical Reports NASA-CR-168252.

CAPÍTULO 2

ESTADO DEL ARTE

2	ESTADO DEL ARTE.....	11
2.1	INTRODUCCIÓN.....	11
2.2	COMBUSTIÓN.....	11
2.2.1	Clasificación de la combustión	11
2.2.2	Parámetros importantes.....	12
2.2.3	Combustión premezclada.....	14
2.2.4	Combustión no premezclada	18
2.3	ESTABILIZACIÓN DE LLAMAS	23
2.4	COMBUSTIÓN EN FLUJOS ROTANTES.....	27
2.4.1	Números característicos para flujos rotantes.....	27
2.4.2	Llamas en flujos rotantes.....	28
2.4.3	Análisis isoterma.....	29
2.4.4	Características del flujo	29
2.4.5	Casos test de referencia.....	31
2.4.6	Mezclado turbulento	34
2.5	ECUACIONES DE CONSERVACIÓN PARA FLUJOS REACTIVOS	35
2.5.1	Conservación de la masa.....	35
2.5.2	Conservación de la cantidad de movimiento.....	35
2.5.3	Conservación de la energía.....	36
2.5.4	Conservación de las especies	36
2.5.5	Ecuación de estado.....	37
2.5.6	Cinética química de las reacciones	37
2.5.7	Ecuación conservación fracción de mezcla	38
2.6	SIMULACIÓN DE LA COMBUSTIÓN	39
2.6.1	Clasificación de los modelos de combustión.....	39
2.6.2	The Laminar Finite-Rate Model.....	40
2.6.3	Eddy Dissipation (ED).....	40
2.6.4	Eddy Dissipation Concept (EDC)	41
2.6.5	Eddy Dissipation (ED)/Finite Rate.....	41
2.6.6	Flamelets	42
2.6.7	Análisis estadístico-PDF.....	42
2.7	ANÁLISIS EN EL DOMINIO DE LA FRECUENCIA	45
2.8	CONCLUSIONES	47
2.9	REFERENCIAS	48

2 ESTADO DEL ARTE

2.1 Introducción

En este capítulo se realiza una revisión sobre los aspectos más importantes de la combustión empleados en flujos reactivos y sobre todo centrándose en la combustión no premezclada y sus conceptos principales.

El análisis de la combustión se considera multidisciplinar, ya que aborda un gran número de ciencias. La termodinámica, ayuda a conocer la viabilidad del proceso, la composición, energía y temperatura liberada. La química estudia la estequiometría. La cinética química trata los mecanismos reacción. La transmisión de calor y masa se centran en la conducción, convección, radiación, efectos de flotabilidad. Por último la mecánica de fluidos estudia el movimiento de los fluidos, la turbulencia, compresibilidad, transporte de partículas.

Las revisiones más importantes del estado del arte de la combustión y las tendencias actuales se pueden apreciar en Candel et al. (2013), Buckmaster et al. (2005) o en Veynante et al. (2002).

Algunas revistas clásicas que tratan el tema pueden ser: Combustion and Flame, Proceedings of the Combustion Institute, Progress in Energy and Combustion Science, Symposium on Combustion and Flame and Explosion Phenomena, Combustion, Flames and Explosions of Gases, Experimental Thermal and Fluid Science, Combustion theory and modelling, Combustion science and technology, Journal of fluid mechanics o Combustion, explosion and shock waves.

Desarrollos clásicos sobre teoría de la combustión se pueden encontrar en Buckmaster, 2008), Peteres (2000) Warnatz et al. (2006), Kuo (1986), Liñán (1993) Williams (1985), Glassman et al. (2008) y Spalding (1970).

2.2 Combustión

2.2.1 Clasificación de la combustión

Según la distribución del combustible y el oxidante, la combustión se puede dividir en premezclada y no premezclada o de difusión.

En combustión no premezclada el combustible y oxidante se mezclan durante la combustión. No hay frente reactivo por lo que no existe velocidad de llama. Los reactantes se inyectan separados (coaxiales o en sentidos opuestos u oblicuos)

En combustión premezclada el combustible y oxidante están mezclados antes de la combustión. Existe un frente reactivo que se desplaza a cierta velocidad. En función de la velocidad de combustión, se puede tener detonación ($Ma > 1$) que se caracteriza por tener un frente de llama acoplado con una onda de choque. En caso de tener baja velocidad ($Ma < 1$), el frente de llama está controlado por el mecanismo de reacción (deflagración).

Existen una situación intermedia entre las dos anteriores denominada parcialmente premezclada.

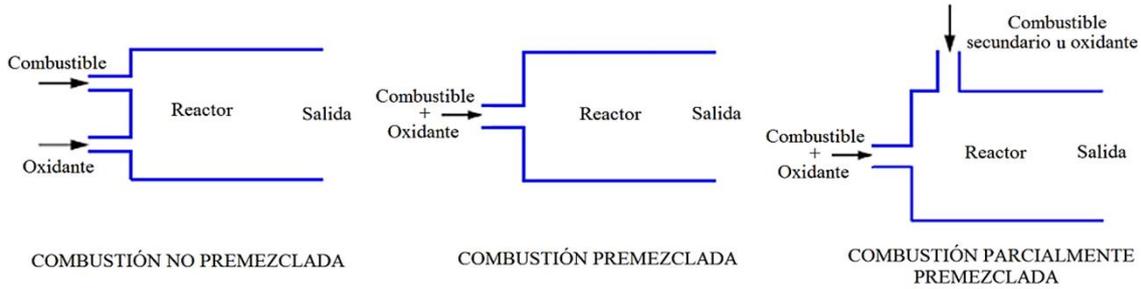


Figura 2-1 Tipos de combustión en función de la configuración del combustible y oxidante

Según el mecanismo de transporte dominante en la llama ($Re_c \sim 4000$), ésta puede ser clasificada en laminar o turbulenta. Esto modifica significativamente el desarrollo de la combustión.

En régimen turbulento, el transporte de calor y masa es mucho más importante. La llama es más corta y adquiere carácter fluctuante, lo que genera ruido. La principal característica es el aumento de la velocidad de quemado, ya que el frente de llama tiene mayor superficie. Dentro del frente de llama, el transporte es más efectivo, lo cual tiene una enorme importancia práctica.

La combustión puede ser monofásica con un flujo forzado de gases, entre monofásica y multifásica, como puede ser el la vaporización de gotas o sprays y por último puede ser multifásica como en la superficie de un sólido, como puede ser la combustión del carbón.

2.2.2 Parámetros importantes

Para la caracterización de las llamas presentes en la combustión, se usan los siguientes números adimensionales:

- Número de Reynolds:

Relaciona las fuerzas de inercia frente a fuerzas viscosas

$$Re = \frac{\rho u_L L}{\mu} \tag{2-1}$$

- Número de Damköhler

Relaciona el tiempo característico del flujo en referencia a las grandes escalas de turbulencia frente a tiempo característico de la reacción. Permite clasificar las reacciones en lentas o rápidas.

Si $Da \gg 1$ la reacción es rápida puesto que el tiempo característico de mezclado es mayor que químico. Si el tiempo químico es más grande que el de mezclado la reacción será lenta. La definición para combustión premezclada se puede escribir de la siguiente

forma. Donde l_0 es la longitud de la escala integral, u' es la fluctuación de la velocidad en la macroescala mientras que δ_L , y s_L son el grosor y la velocidad de llama premezclada laminar

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_0 / u'}{\delta_L / s_L} = \frac{l_0}{\delta_L} \frac{u'}{s_L} \quad 2-2$$

- Número de Karlovitz

Relaciona la tasa del tiempo característico de la reacción frente a la escala temporal de Kolmogorov. Es el número de Damköhler referido a la escala de la turbulencia de Kolmogorov.

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L / s_L}{l_\eta / u_\eta} = \frac{1}{Da_\eta} \quad 2-3$$

- Número de Mach

Indica la compresibilidad del flujo, relacionando la velocidad de convección frente a la del sonido. Para $Ma < 0.3$ se considera flujo incompresible.

$$Ma = \frac{u_L}{a} \quad 2-4$$

- Número de Boltzman

Representa el cociente entre el flujo de calor por convección y el flujo de calor por radiación. Para $Bo < 10$ se considera importante la radiación

$$Bo = \frac{(\rho v c_p T)_{inlet}}{\sigma T_{ad}^4} \quad 2-5$$

- Número de Lewis

Representa el cociente entre la difusividad térmica y la másica

$$Le = \frac{\alpha}{D_m} = \frac{Sc}{Pr} = \frac{k}{\rho c_p D_m} \quad 2-6$$

- Número de Prandtl

Representa el cociente entre el transporte de cantidad de movimiento y la conducción térmica

$$Pr = \frac{c_p \mu}{k} \quad 2-7$$

- Número de Schmidt

Representa el cociente entre la difusión de cantidad de movimiento y la difusión de masa.

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_m} \quad 2-8$$

- Número de Strouhal

Describe el comportamiento oscilatorio de un flujo en caso de desprendimiento de vórtices.

$$St = \frac{f \cdot L}{v} \quad 2-9$$

2.2.3 Combustión premezclada

A pesar de que la tesis trata sobre combustión no premezclada es necesario hablar también de combustión premezclada porque comparte muchos conceptos con ésta.

Mallard y le Chatelier (1883) realizaron los primeros estudios sobre velocidad de propagación de llamas y ondas de deflagración.

En 1889, Mikhelson estableció las bases sobre la estructura de la llama al analizar la propagación de éstas en un mechero Bunsen.

Zeldovich, Frank-Kamanetski y Semenov en 1938 mejoraron los modelos anteriores añadiendo las ecuaciones de conservación de las especies a la de la energía.

En Damköhler (1947) se introdujeron las regiones asintóticas de la combustión turbulenta. Los estudios fueron continuados por Barrère (1974). Borghi (1985) completó el estudio con lo que se conoce como hoy diagrama de Borghi.

En Williams (1985) se tratan los distintos procesos de combustión turbulenta (premezclada y no premezclada), en función del tamaño y velocidad típica del proceso, así como la estructura de las llamas.

Habitualmente se emplea el diagrama de Borghi para caracterizar combustión premezclada. Si se expresan en el cociente de fluctuación de la velocidad (u') y la velocidad de propagación laminar de la llama (S_L) frente a la dimensión característica de la macroescala (l_0) y la anchura de llama laminar de forma logarítmica se obtiene el diagrama de la Figura 2-2.

Se muestra la estructura de las llamas laminares, arrugadas y en capas delgadas en la Figura 2-3. En la Figura 2-4 se muestra la estructura de las *Flamelets* en remolino y de una reacción distribuida.

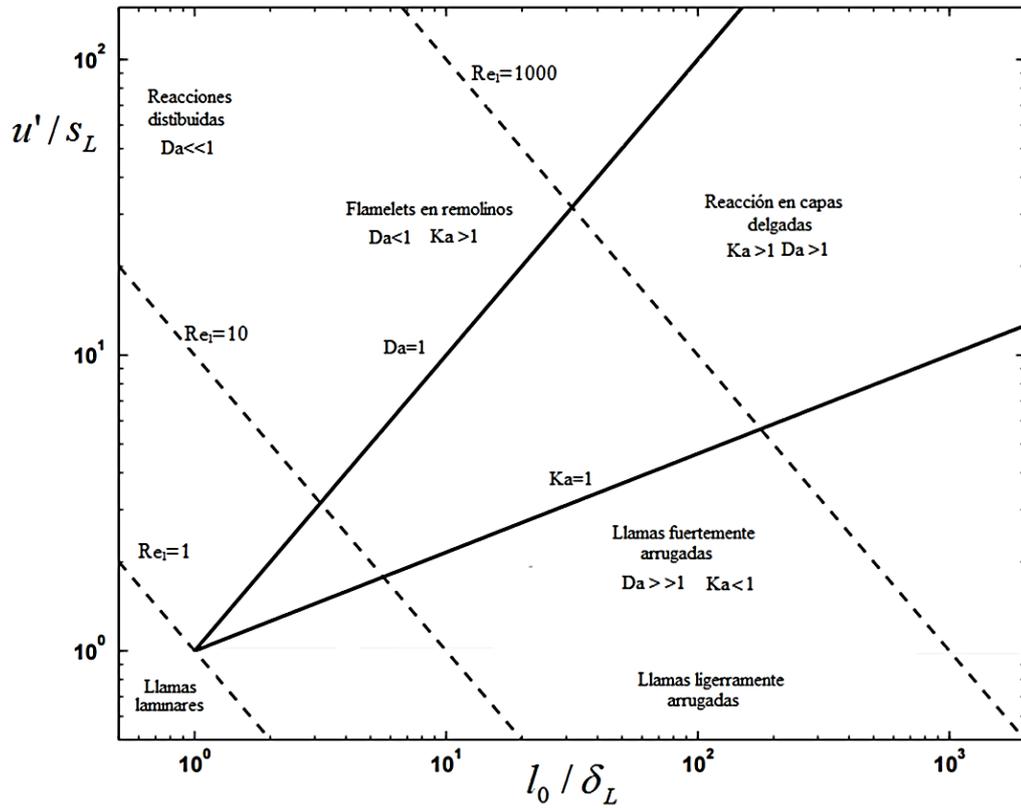


Figura 2-2 Diagrama de combustión premezclada turbulenta.

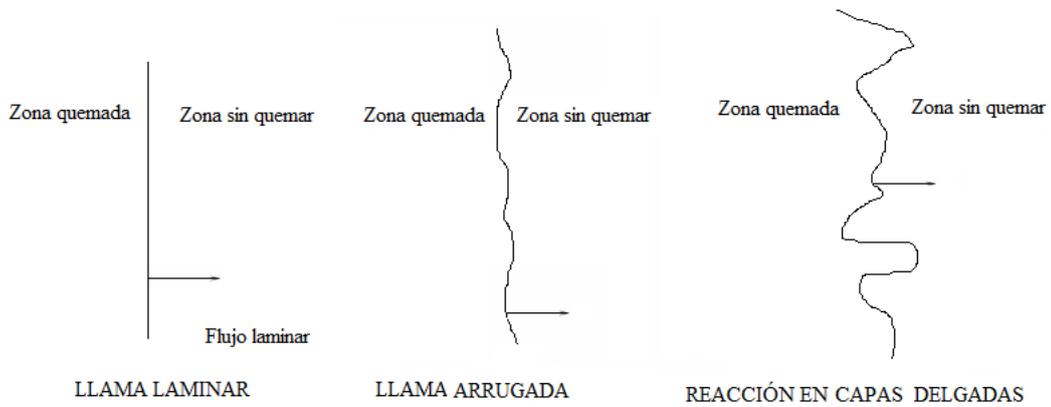


Figura 2-3 Estructura de las llamas laminares, arrugadas y en capas delgadas

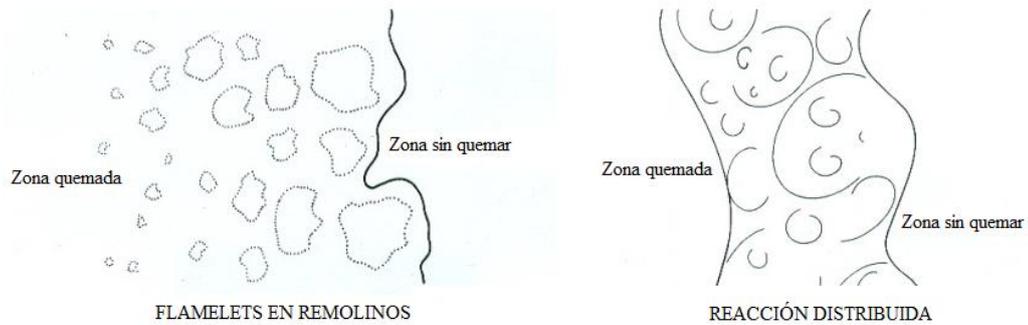


Figura 2-4 Estructura de los Flamelets en remolino y de una reacción distribuida.

Las curvas de Reynolds, Karlovitz y Damköhler constantes representadas sobre el diagrama en forma logarítmica son rectas y pueden delimitar unas zonas con cualidades de combustión claras:

- La recta $Re_l = 1$ delimita la zona de combustión laminar y de combustión turbulenta.
- La zona $Ka = 1$ delimita la zona en la que los torbellinos no pueden romper el frente de llama y son incapaces de formar parcelas de mezcla fresca entre gases quemados, por lo que el frente de llama se comporta localmente como laminar pero comienza a arrugarse y ondularse.
- En la zona con $Ka > 1$ y $Da > 1$, los torbellinos más pequeños sí que pueden modificar la estructura interna de la llama, por lo que la combustión no solo está gobernada por el transporte molecular, sino que también lo está por la turbulencia. Se puede apreciar un frente de llama concreto.
- En la zona $Da < 1$, el tiempo característico del flujo en referencia a las grandes escalas de la turbulencia es menor que el tiempo característico de la reacción por lo que el proceso de combustión y la tasa de reacción viene dominada totalmente por la reacción química. El flujo no afecta a la combustión. La combustión se desarrolla en *flamelets* o llamas unidimensionales.

Usando los parámetros descritos se pueden definir dos límites claros

- $Da = 0$ los efectos cinéticos o turbulentos son totalmente despreciables.
- $Da = \infty$ que corresponde al caso de química rápida. En este caso el tiempo de reacción es mucho más pequeño (reacciones rápidas) que el tiempo de mezcla. Muchas aplicaciones industriales se encuentran en esta zona (ver Figura 2-5). Esto comúnmente se conoce como “mezclado es equivalente a quemado”. Dada la larga disparidad entre escalas de tiempos de reacciones, la actividad química puede reducirse a una fina capa llamada *flamelet* o *flamesheets* o llamas unidimensionales. El término *flamelet* hace referencia a que a pesar de que la combustión sea turbulenta, la reacción tiene lugar en pequeñas y finas capas con estructura laminar.

Esta hipótesis permite aproximar la química de la llama usando valores de equilibrio para las propiedades locales sin cometer un gran error.

También se puede usar un diagrama para clasificar la combustión mediante el número de Damköhler y el número de Reynolds como se muestra en Candel et al. (2013)(Figura 2-6).

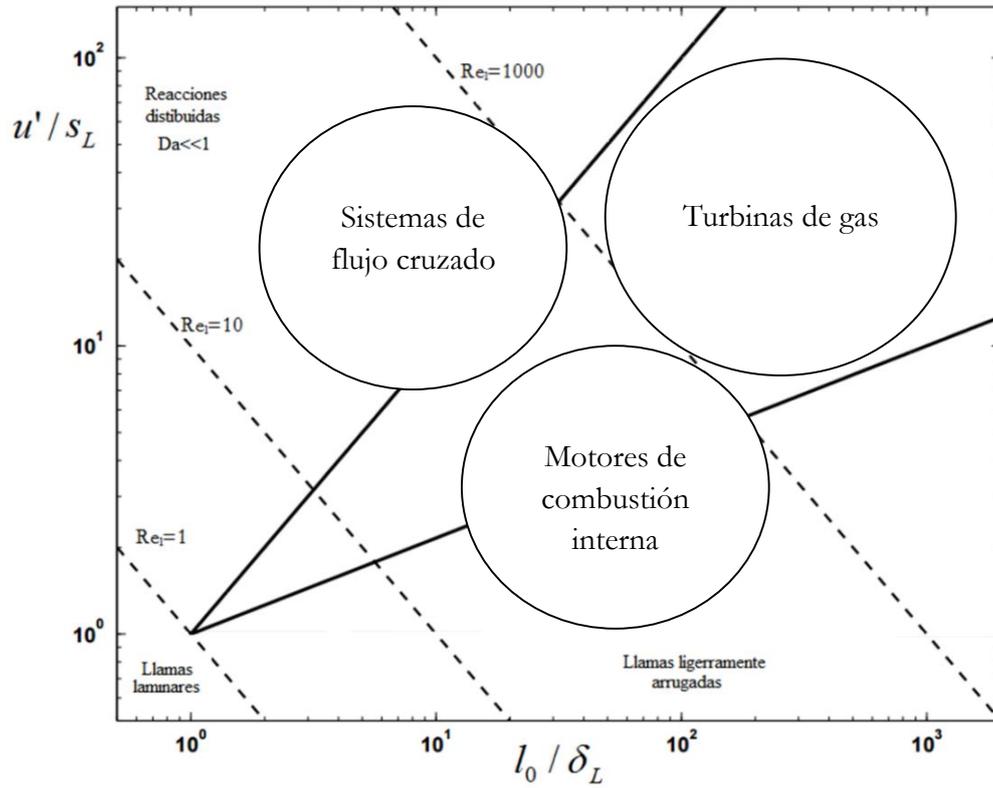


Figura 2-5 Clasificación de las aplicaciones industriales en un diagrama de Borghi.

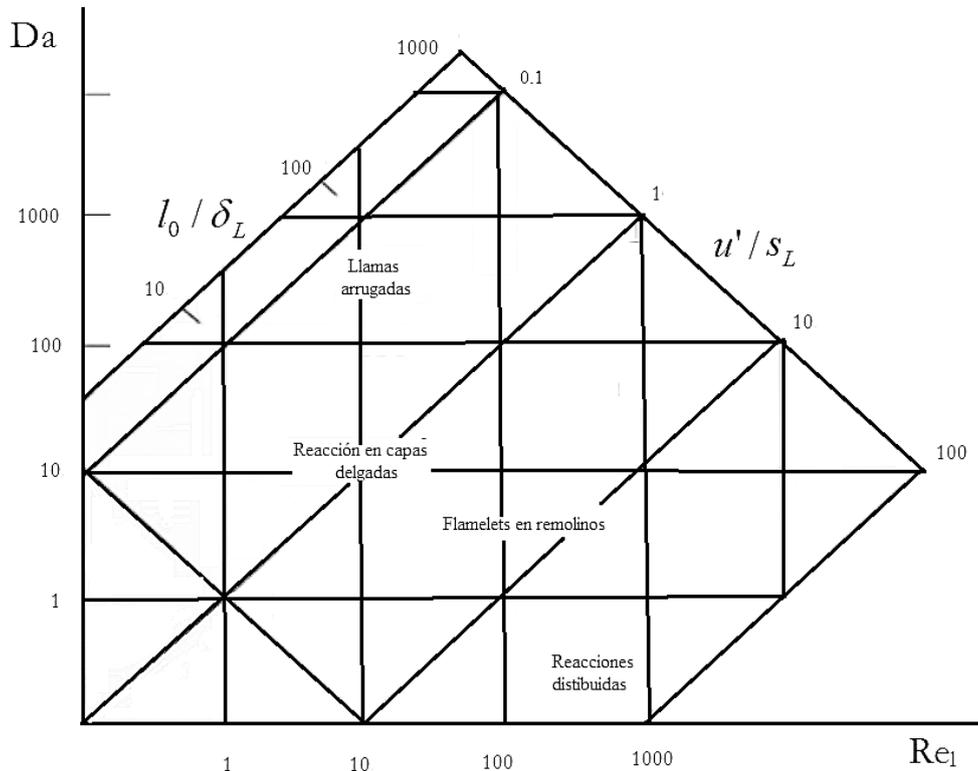


Figura 2-6 Diagrama de combustión premezclada turbulenta.

2.2.4 Combustión no premezclada

La combustión no premezclada o combustión con llamas de difusión se caracteriza por introducir los reactantes a la cámara de combustión de forma separada, en distintas corrientes. Los procesos de mezcla y reacción química se producen de un modo simultáneo.

El combustible y el oxidante están separados inicialmente y el proceso de mezcla es requisito para que la reacción química se produzca. En la combustión no premezclada no hay frente reactivo y por tanto no existe velocidad de llama.

El combustible y oxidante ocupan regiones del espacio excluyentes entre si y coexisten solo en un volumen de pequeño espesor, prácticamente una superficie.

Algunos ejemplos de combustión no premezclada turbulenta pueden ser motores diésel, turbinas de gas, hornos industriales, e incendios. A pesar de ser muy utilizada, debido a que es más segura que la premezclada, la combustión no premezclada o por difusión está menos desarrollada por su complejidad. La tesis se centrará en este tipo de combustión.

El tiempo de reacción suele ser pequeño en las zonas de alta temperatura. Esto provoca que los reactantes solo coexistan en finas capas de reacción, o *flamelets*.

Esta superficie actúa como frontera de separación entre la región del combustible y la del oxidante. En que para este tipo de llamas los fenómenos de transporte molecular de masa y energía son los responsables de poner en contacto los reactivos y de mantener y controlar la llama.

2.2.4.1 El problema de Burke-Schumann

Los primeros desarrollos de la combustión no premezclada o por difusión fueron llevados a cabo en los años 20.

La aproximación de Burke-Schumann de química rápida para llamas de difusión deriva en límites asintóticos y se trató en Burke et al. (1928). Gracias a ella se ha simplificado enormemente la combustión. Ésta se desarrollará de forma breve en el apartado 2.5.7.

El problema Burke-Schumann consiste en una llama de difusión en dos toberas coaxiales. Por la interior circula combustible y por la exterior oxidante. Pueden darse dos configuraciones distintas de llama en función de la cantidad oxidante y combustible (Figura 2-7).

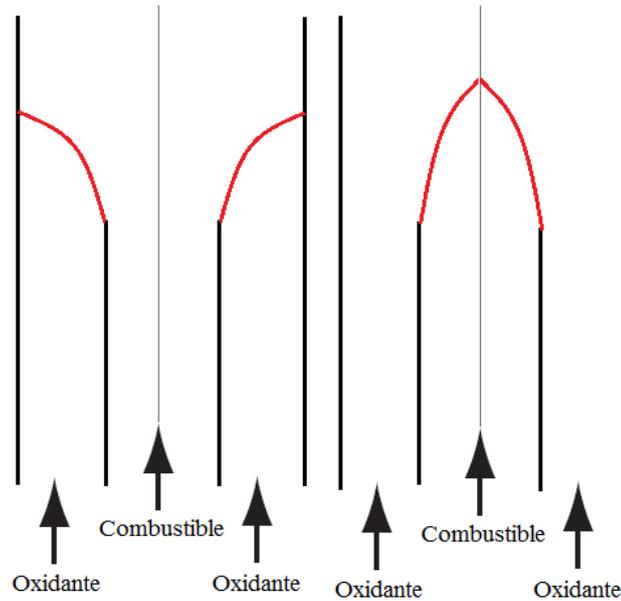


Figura 2-7 Esquema del problema de Burke-Schumann. Llama sobreventilada (der.) y subventilada (izq.)

Se introdujo esta descripción asintótica para el análisis de los sistemas de combustión no premezclados. En el caso límite de reacción química infinitamente rápida, el combustible y el oxidante no pueden coexistir de forma simultánea, sino que están separados por una capa de reacción infinitamente delgada o superficie de llama.

A la llama llegan el combustible y oxidante en proporciones estequiométricas, por difusión desde ambos lados de la reacción.

Se deduce que si la reacción es rápida, el problema de combustión se traduce en un problema fluidodinámico, en el que el transporte de masa y calor es clave.

Habitualmente gran parte del interés de la combustión no premezclada se basa en la parte turbulenta ya que ésta es dominante.

Generalmente las llamas son turbulentas, sin embargo el estudio laminar es la base para el turbulento.

2.2.4.2 Estructura y clasificación de las llamas no premezcladas

La configuración no premezclada laminar corresponde al problema de Burke-Schumann (Figura 2-7) y se utilizará para describir la estructura de la llama inicialmente, por sencillez. En esta configuración la llama surge del borde de la tobera interior, y separa los dominios de forma clara. La llama será sobre ventilada, o de pluma si hay exceso de oxidante. Si ocurre que hay exceso de combustible, la llama será se expande hasta las paredes del tubo exterior y se denomina subventilada (Figura 2-7). La forma de la llama depende del mezclado y del problema fluidodinámico. El análisis de esta llama laminar fue el fundamento para desarrollar posteriormente la combustión no premezclada turbulenta. La Figura 2-8 muestra la estructura típica de una llama laminar de difusión sobreventilada.

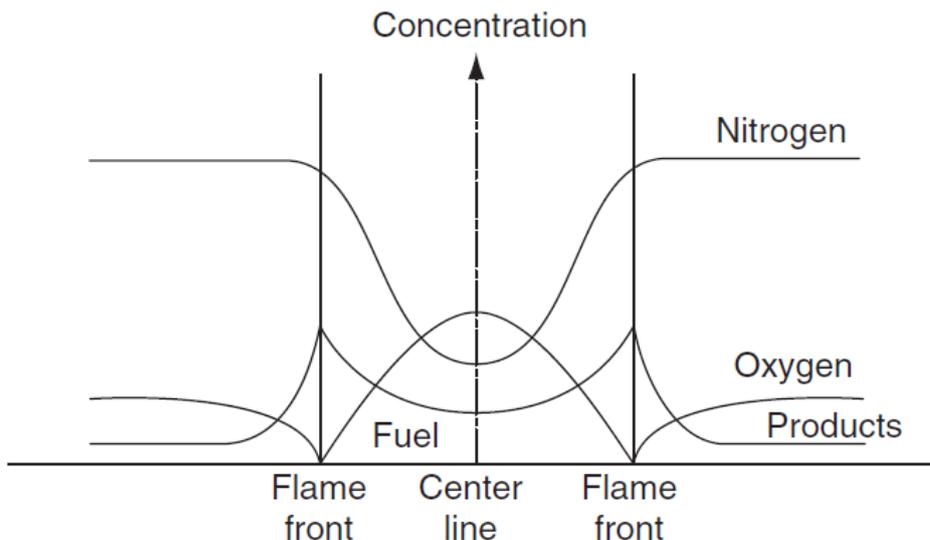


Figura 2-8 Estructura de una llama laminar de difusión sobreventilada. (Glassman et al. 2008)

Liñán y Williams trabajaron en la cinética de reacción y en la estructura de las llamas de difusión, analizando de forma detallada las hipótesis del problema de Burke-Schumann. Williams (1985) también trabajó en la descripción de la estructura de la llama y en los conceptos que la teoría de Burke-Schumann no podía explicar, como las discontinuidades existentes en la llama.

A pesar de que es necesario analizar las llamas laminares, en la industria se trabaja casi siempre con flujos turbulentos.

Los primeros estudios sobre la transición a llamas turbulentas y efectos de flotabilidad tuvieron lugar en 1949 por Hotel y Hawthorne y se detallan en Glassman et al. (2008).

Posteriormente Liñán y Williams propusieron el diagrama de variación de la longitud de llama de difusión en función de la velocidad (Figura 2-9).

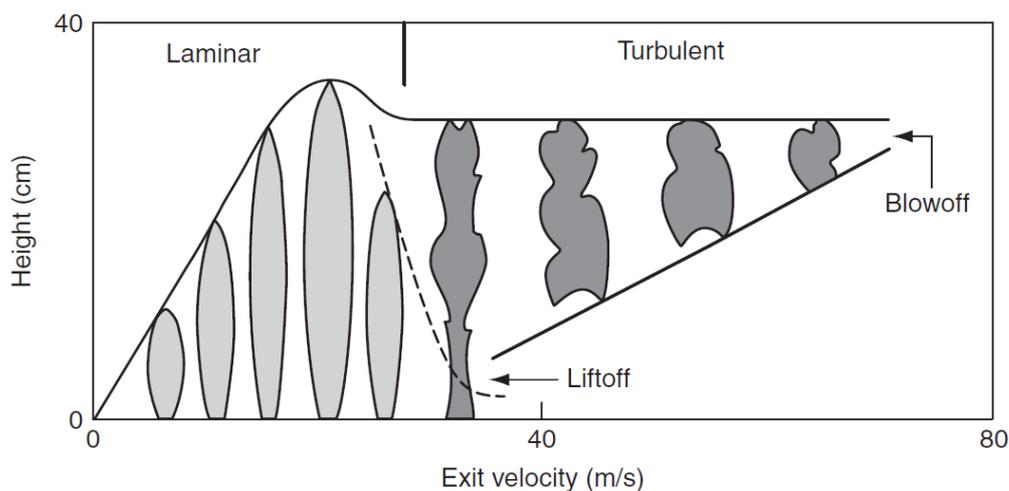


Figura 2-9 Variación de la longitud de llama de una llama de difusión en función de la velocidad (Glassman et al. 2008)

Existe una velocidad de llama a partir de la cual se vuelve levantada (*liftoff*) y una velocidad límite que corresponde al apagado de ésta (*blowoff*).

Numerosos estudios sobre la estructura de llamas no premezcladas han tenido lugar posteriormente, por ejemplo el realizado en Ibrahim et al. (1985).

En referencia a la caracterización de los regímenes de la combustión, es importante notar que para el caso premezclado se ha empleado una relación de longitudes y una de velocidades, pero para el caso de la combustión no premezclada es complicado extender el análisis, debido a que no existe una velocidad característica.

2.2.4.3 Regímenes de la combustión no premezclada

El espesor de la llama no es fácilmente identificable debido a que está controlado por la aerodinámica de la mezcla. Los primeros análisis de la estructura de llamas de difusión fueron realizados en Friedlander S.K. et al. (1963) y Liñán (1974).

Existe mucha variabilidad en la clasificación de la combustión no premezclada en la literatura debido a la complejidad de ésta. Según Veynante et al. (2002) existen tres grandes grupos para clasificar las escalas características:

- El régimen turbulento se caracteriza mediante el número de Reynolds y la zona de reacción con el número de Damköhler.
- La fracción de mezcla define el mezclado turbulento y el número Damköhler caracteriza la llama.
- De forma análoga a la combustión premezclada se puede caracterizar la combustión con el cociente de velocidades definido por la intensidad de la turbulencia y la velocidad de llama laminar premezclada ($u' / (\delta_i / \tau)$) frente al ratio de longitudes definido por la escala integral y el espesor de la llama (r / δ_i).

En función de estos criterios se pueden definir diagramas para caracterizar la combustión no premezclada.

Si se analiza la estructura de las llamas en función del tercer criterio se pueden identificar dos números de Damköhler, Da_{LFA} (steady laminar flamelet assumption, LFA) y Da_{EXT} (extinction). Cuando Damköhler es mayor que Da_{LFA} , la llama se caracteriza por ser laminar y estacionaria y la estructura interna no es afectada por los vórtices. Si el número de Damköhler es mayor que Da_{EXT} , la llama se extingue. En el rango intermedio aparecen fuertes inestabilidades y efectos transitorios.

En la Figura 2-10 se muestra el diagrama de regímenes de combustión no premezclada descrito por Cuenot y Poinot y recogido en Veynante et al. (2002) siendo u' la fluctuación de la velocidad, δ_i el grosor de la llama τ el tiempo característico químico y r el tamaño característico de los vórtices.

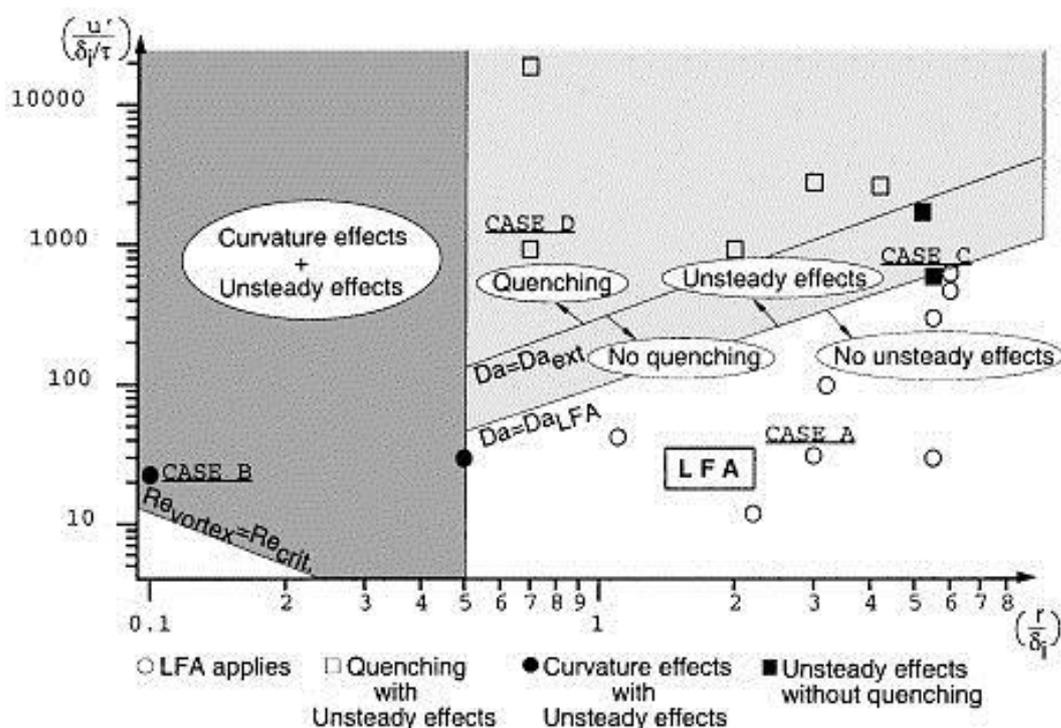


Figura 2-10 Diagrama de regímenes de combustión no premezclada por Cuenot and Poinot (Veynante et al. 2002).

Si se emplea el primer criterio de clasificación y se reescribe el número de Damköhler como $Da = \alpha \sqrt{Re Da_\eta}$ siendo α un parámetro experimental, se observa que valores de $Da_\eta = cte$ pueden separar las regiones de estructura de llama laminar y la zona de apagado. Para $Re < 1$ la llama es laminar. Esta clasificación puede apreciarse en la Figura 2-11.

Otras clasificaciones para los regímenes de la combustión no premezclada se pueden ver en Liñán et al. (2015).

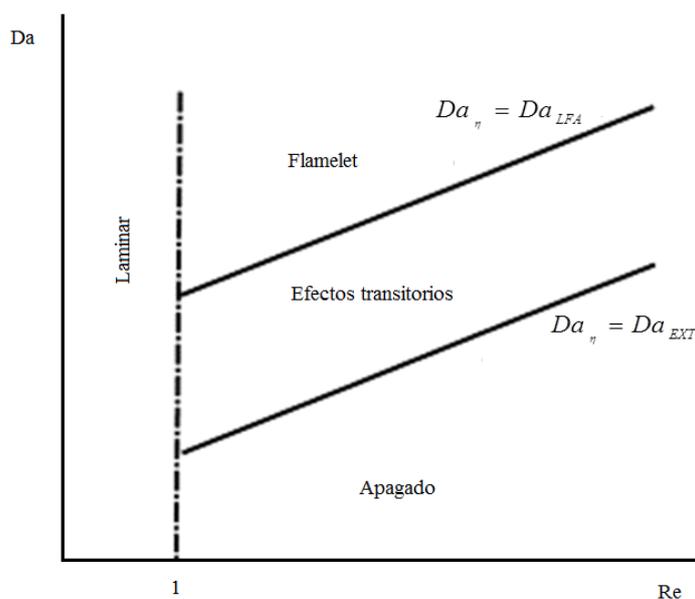


Figura 2-11 Diagrama de regímenes de combustión no premezclada

2.3 Estabilización de llamas

La aerodinámica del quemado debe proporcionar una distribución uniforme del aire y del combustible. Si la llama no es estable se puede presentar la extinción de la combustión o dar como resultado varias pulsaciones en la cámara de combustión que dañarán los equipos y en casos extremos se pueden producir explosiones. Existen muchas técnicas para estabilizar la llama.

Los primeros análisis sobre estabilidad de llamas fueron realizados en los años 60 por Lewis, B. y von Elbe, G.

Existen diversos métodos de estabilización de llamas turbulentas:

- Flujo cruzado:

Se inyecta combustible de forma perpendicular u oblicua al flujo de aire (Figura 2-12).

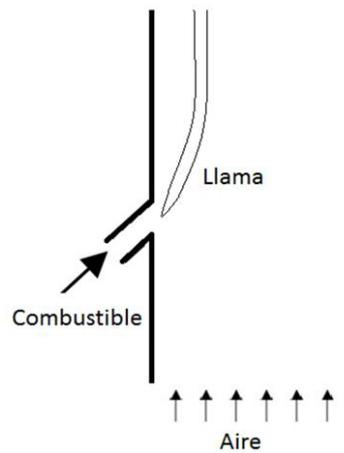


Figura 2-12 Estabilización de la llama mediante flujo cruzado

- Pantallas estabilizadoras

Otra configuración para llamas no premezcladas puede ser la empleada en el quemador de Wolfhard Paker que utiliza unas pantallas para estabilizar la llama (Figura 2-13).

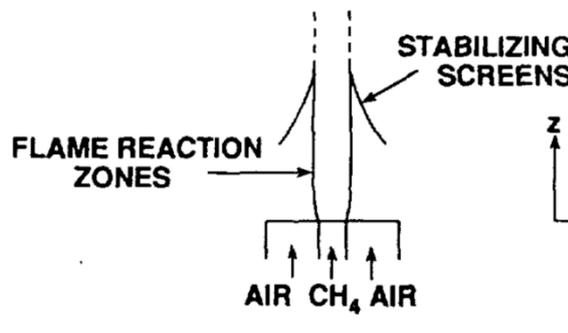


Figura 2-13 Estabilización de la llama mediante pantallas. Quemador de Wolfhard Paker (Norton et al. 1993)

- A contracorriente

La configuración a contracorriente es clásica y permite estudiar de forma sencilla combustión por difusión o no premezclada (Counterflow diffusion flame). Consiste en un chorro de combustible y otro de oxidante que fluyen en sentidos opuestos.

La contraposición del flujo genera un mejor mezclado gracias a los esfuerzos cortantes de ambas corrientes. Además se produce una zona de remanso por interacción de los dos chorros. Se pueden producir problemas por alta temperatura y deposición de carbonilla en los inyectores. La Figura 2-14 muestra cuatro configuraciones de llamas a contracorriente.

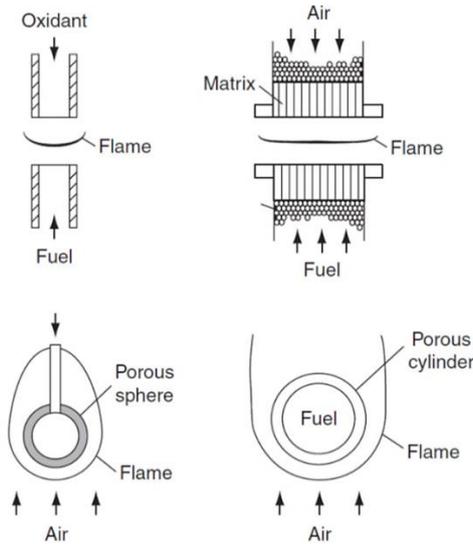


Figura 2-14 Configuraciones de llamas a contracorriente (Glassman et al. 2008 y Tsuji 1982)

- Estabilización por medio de obstáculos o bluff bodies

Se genera una zona de recirculación interponiendo un obstáculo (generalmente un cuerpo romo) en el flujo permitiendo que la llama encuentre una estela donde permanecerá (Figura 2-15). Las propiedades de la recirculación (tamaño e intensidad) tienen una influencia significativa en las propiedades de la llama. Mediante el empleo de obstáculos que generen recirculaciones, se genera una caída de presión y una alta temperatura y deposición de carbonilla en la superficie estabilizadora.

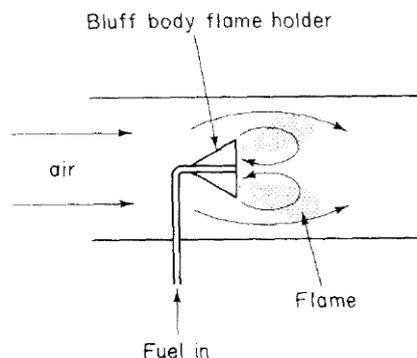


Figura 2-15 Estabilización de la llama mediante un obstáculo en el flujo. (Flagan et al. 1988)

- Llamas en chorro (Jet flames)

Las llamas en chorro sin cuerpo estabilizador suelen ser estabilizadas por medio de llamas piloto. El perfil de la velocidad inicial de una llama en chorro es similar al flujo completamente desarrollado en tuberías. La zona de la llama suele ubicarse en la capa de mezcla del chorro. Existen muchos tipos de llamas en chorro, desde laminares a turbulentas, inyectadas en V u oblicuas.

- Generación de swirl

La tecnología actual de combustión se centra en emplear quemadores estabilizados por “swirl”, o giro. Esta tecnología se usa ampliamente en calderas comerciales e industriales, turbinas de gas y motores de avión (Figura 2-16). Consiste en generar chorros con giro que inducen poca pérdida de presión, evitan problemas de ensuciamiento o de puntos calientes y producen un alto mezclado y menores emisiones. Un chorro con giro induce una zona de recirculación en la que se establecen puntos de remanso en cuyo entorno la llama se puede anclar ya que existe baja velocidad.

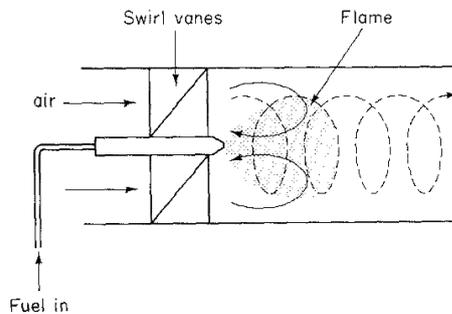


Figura 2-16 Esquema de la estabilización de llamas por giro (Flagan et al. 1988)

Una revisión detallada de los tipos de quemadores con rotación se analiza en Al-Abdeli et al. (2015) y en Ishizuka (2002). Existen dos tendencias distintas en cuanto a la intensidad de rotación del flujo como se indica en Therkelsen et al. (2013) y Roback et al. (1983). La Figura 2-17 muestra el generador de swirl de dos quemadores estabilizados por giro.

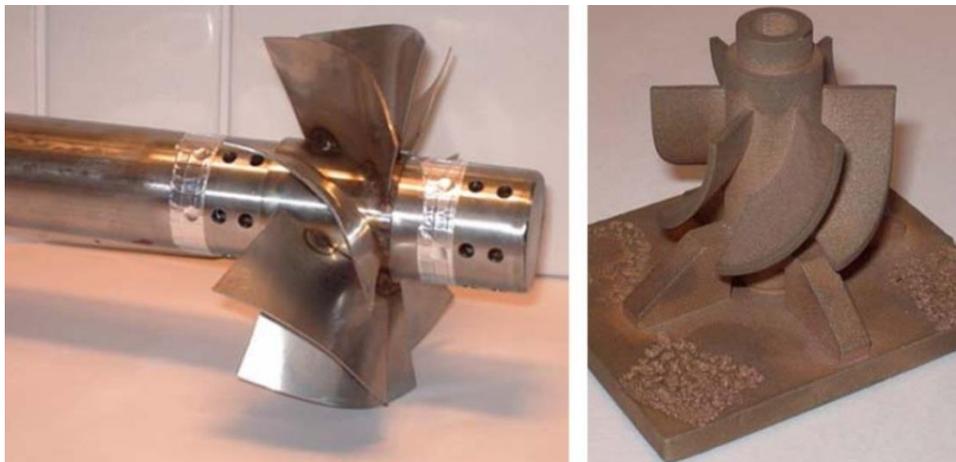


Figura 2-17 Generador de swirl de un quemador de flujo rotante de 370kW (izq.) y 20 kW (dcha.) (Oystein, 2004)

En caso de tener alta rotación se genera una zona de recirculación que es el mecanismo esencial para la estabilización de la llama (Figura 2-18). La rotación se puede producir mediante inyección tangencial o mediante aletas. La intensidad de rotación (generalmente expresado en términos de número de Swirl, (ver 2.4.1) dicta los tamaños y la geometría de la zona de recirculación y también la mayoría de las propiedades de la llama. La recirculación genera una expansión del fluido permitiendo que el combustible se mezcle rápidamente y que la temperatura sea más baja, por lo que se reducirán las emisiones de óxidos nitrosos (NO_x).



Figura 2-18 Estabilización de la llama mediante alto swirl (izq.) Prototipo de quemador por bajo giro de bajas emisiones (dcha.) (Cheng 2006)

Desde los años 90 se están desarrollando quemadores de bajo giro según se indica en Chan et al. (1992). Posteriormente se ha implementado este concepto en Cheng et al. (2000). Se pueden ver varios análisis sobre estos quemadores en Plessing et al. (2000) Sequera et al. (2007) o en Littlejohn et al. (2002) entre otros. No existe zona de recirculación pero si de divergencia.

- Flujo inverso con punto de remanso

Se realiza un análisis de la combustión con este método de estabilización de la llama en Duwig et al. (2014) (Figura 2-19).

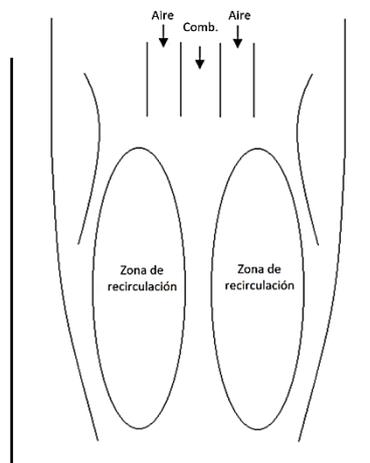


Figura 2-19 Estabilización de la llama mediante flujo inverso con punto de remanso (Stagnation Point Reverse Flow Combustor, SPRF)

Otras opciones de estabilización de la llama pueden ser el uso de una expansión brusca (Backward Facing Step) o mediante una llama impactante (Impinging flame)

2.4 Combustión en flujos rotantes

Como se ha visto anteriormente, las tendencias actuales en la industria se centran en la combustión en flujos rotantes debido a la eficiencia, sencillez, baja pérdida de presión, generación de carbonilla, regulación y alto ratio de potencia térmica en relación al volumen.

La llama en un flujo rotante utiliza un mecanismo aerodinámico debido a la acción centrífuga para estabilizarse. La región situada entre la zona de recirculación y el flujo externo posee baja velocidad, altos esfuerzos cortantes. Es la zona en la que se mezclan el combustible y el oxidante.

La recirculación de los productos calientes es un precursor del reencendido de la mezcla fresca. Además, la recirculación produce un alto cizallamiento y mayor tiempo de residencia que mejora la mezcla en la zona de la llama, disminuye las temperaturas y por tanto los NO_x según Chomiak et al. (2007).

2.4.1 Números característicos para flujos rotantes

- Número de Swirl

En el estudio de chorros con giro, es necesario definir un número adimensional característico de la rotación para poder realizar comparaciones entre diferentes chorros.

Este número podría ser el cociente de velocidad tangencial media y de la axial, pero ambas son cantidades no conservadas a lo largo del radio. Por eso se prefiere evaluar el grado de swirl mediante el cociente entre el momento angular medio y el momento lineal axial medio (número de swirl, S).

El número de Swirl permite caracterizar la componente tangencial del chorro anular. Éste se define según la ecuación 2-10.

$$S = \frac{\int \rho v_{\theta} v_z 2\pi r^2 dr}{d_m \int \rho v_z^2 2\pi r dr} \quad 2-10$$

- El número de Skewness

También llamado tercer momento estandarizado. Permite identificar la simetría axial del chorro anular. Éste parámetro se define como:

$$S_{v\theta} = \frac{\overline{(v_{\theta} - \bar{v}_{\theta})^3}}{\sigma_{v_{\theta}}^3} = \frac{\overline{(v_{\theta} - \bar{v}_{\theta})^3}}{\left[\overline{(v_{\theta} - \bar{v}_{\theta})^2} \right]^{3/2}} \quad 2-11$$

- Número de Richardson

El número de Richardson (R_i) expresa la relación entre la energía potencial y la energía cinética de un fluido. También suele emplearse el número de Froude (Fr) como medida de los efectos de flotabilidad. Se define como:

$$R_i = \frac{gh}{v^2} \quad 2-12$$

2.4.2 Llamas en flujos rotantes

Cuando se tiene una llama en un flujo rotante a una elevada velocidad de giro se produce un mecanismo aerodinámico característico que genera una elevada velocidad de propagación. El valor crítico se caracteriza por un número de Richardson (también se suele emplear el número de Froude para caracterizar los efectos de flotabilidad en llamas) cercano a la unidad. Si esto ocurre se genera una llama con forma axilsimétrica.

Margolin y Karpov, (1974) suministraron resultados experimentales del desarrollo de una llama en un flujo rotante. Mostraron que cuando la ignición de la mezcla se produce en la periferia del vórtice, el núcleo de la llama se precipita hacia el eje de rotación y lo alcanza en un tiempo inferior al periodo de rotación. Una vez que el núcleo de la llama alcanza el eje de rotación, la llama adopta una forma alargada propagándose a lo largo del eje de rotación. El análisis teórico sobre la deformación del núcleo de la llama sugiere un radio de llama independiente de la velocidad de rotación y una longitud de llama con una dependencia lineal de la velocidad de rotación. Estos resultados fueron validados para llamas metano aire en Margolin y Vasilik (1983) y Gorczakowski (2000).

El efecto de la pared sobre una llama se trata en Hanson y Thomas (1984) mientras que la propagación de llama a través del eje rotación se muestra en Margolin y Karpov (1989).

La propagación de llamas a lo largo de vórtices se trata en Ishizuka (2002). Se realiza una detallada revisión de los trabajos experimentales, numéricos y teóricos acerca del tema. Además se discute sobre la interacción entre la llama y el vórtice. En combustión con anillos de vórtices, se caracterizan dos zonas con diferente comportamiento fluidomecánico. El núcleo que se comporta como un vórtice forzado y la región exterior donde el flujo es irrotacional.

Respecto al tiempo de ignición es interesante notar que Dwyer (2000) muestra que éste disminuye al aumentar la rotación en la cámara de combustión.

La extinción es un aspecto importante de la propagación de la llama en flujos rotantes. Este concepto se muestra en Gorczakowski (2000) y Jarosinski (2006). La extinción de la llama a altas velocidades de rotación fue tratada por Hanson y Thomas (1984).

En referencia a los límites de flamabilidad es importante notar que están afectados por la velocidad de rotación. Las tendencias son distintas para bajos números que para

altos números de Lewis. Por ejemplo para mezclas ricas de propano el límite aumenta con el régimen de giro pero para mezclas ricas de metano el límite disminuye con el régimen de giro.

2.4.3 Análisis isoterma

Es de vital importancia el análisis isoterma de flujos rotantes en quemadores ya que como el número de Damköhler de ciertos quemadores es muy elevado, la hipótesis de reacción instantánea es factible y no es necesario el empleo de un mecanismo de reacción sino que basta con la resolución de una ecuación de conservación para la fracción de mezcla. Por lo tanto el mecanismo que controla la reacción es la capacidad de mezcla de los flujos y por consiguiente la aerodinámica de éste. Este es un aspecto muy ventajoso ya que los mecanismos de reacción hacen que el problema sea rígido, con un amplio rango de variación de las escalas temporales, lo que supone un elevado coste computacional.

La aerodinámica y la caracterización del flujo de forma isoterma es un prerrequisito para el análisis, por lo que la primera parte de la tesis consistirá en centrarse en un análisis isoterma. Además el análisis isoterma desacoplado de la combustión permite realizar una caracterización más rápida y precisa de la aerodinámica.

La combustión se ve fuertemente afectado por la interacción con zonas de recirculación, según se muestra en Rotman et al. (1988) y Dunn-Rankin et al. (1988).

Algunos estudios no reactivos han tratado de describir la interacción de remolinos de chorros coaxiales, tales como Nemoda et al. (2005), Sadiki et al. (2006), Olivani et al. (2007) Ishizuka et al. (2007) y Duquenne et al. (1993). Giannadakis et al. (2008) presentan resultados experimentales. Un análisis detallado de la estructura de las zonas de recirculación interior y exterior es hecho por Jones et al. (1982).

Hay una amplia gama de estudios experimentales o numéricos que caracterizan el patrón de flujo para diferentes números de swirl. Entre ellos se pueden citar: Palm et al. (2006), Ranga Dinesh et al. (2012), Maciel et al. (2008), García-Villalba et al. (2006), Valera-Medina et al. (2009) o Durox et al. (2013).

2.4.4 Características del flujo

Hay dos tipos de quemadores en función de las características del flujo según se muestra en Therkelsen et al. (2013) y Roback et al. (1983). Se pueden encontrar quemadores de bajo o de alto swirl.

Se ha mostrado anteriormente que la estabilidad de la llama no depende únicamente de la cinética de reacción, sino que está ampliamente afectada por la aerodinámica. La mayoría de los quemadores tienen flujo turbulento para mejorar la mezcla y la velocidad de combustión, por lo que la eficiencia aumenta. Quemar mezclas pobres minimiza las emisiones NO_x , pero se requiere que la concentración y temperatura sean uniformes además de una llama estable.

Con objeto de promover la mezcla en quemadores con flujo rotante, se hace interaccionar un chorro central con reducida cantidad de movimiento con un chorro anular que además de tener elevada cantidad de movimiento axial tiene una cierta componente acimutal caracterizada por el número de swirl. Se produce un patrón de flujo característico en el que se pueden observar dos zonas:

- Zonas de recirculación

En la mayoría de los quemadores, las condiciones idóneas se logran mediante la creación de zonas de recirculación que depende entre otros parámetros del número de Swirl. Se distinguen dos zonas características: la zona de recirculación exterior o ORZ que surge como consecuencia del desprendimiento de la capa límite de la tobera exterior al sufrir la expansión brusca de la cámara de combustión y la zona de recirculación o IRZ que se asocia a la rotación del chorro de la tobera exterior.

- Zona de cortadura

Se genera en la entrefase entre las zonas de recirculación. En esta zona se produce un rápido mezclado y la velocidad es baja similar a la de una llama turbulenta. Por lo tanto esta zona está controlada por la aerodinámica. Sin embargo una combustión estable no solo requiere que la recirculación esté bien posicionada. El tiempo de residencia debe ser bajo para evitar las cadenas de reacción del NO_x a bajas temperaturas. Algunos autores muestran que hay un número de Swirl óptimo para cada quemador que minimiza el tiempo de residencia. El grado de rotación del chorro de la tobera exterior influye en el tiempo en el que el fluido está en contacto con altas temperaturas en la zona de recirculación.

El patrón de flujo puede modificarse por la intensidad de rotación. Se observa que da lugar a unas zonas características del quemador (Figura 2-20) como se indica en Roback et al. (1983) y Guo et al. (2002).

- Flujos con números de Swirl inferiores al crítico ($S < S_c$) producen distribuciones gaussianas de la velocidad axial siendo ésta mínima en el eje de la tobera y disminuyendo al aumentar la distancia radial al eje. No existe zona de recirculación interior o IRZ.
- Cuando el número de Swirl es cercano al valor crítico, ($S \sim S_c$) la semejanza de los perfiles se alcanza en distancias más alejadas aguas debajo de la tobera, pero en ningún caso hay flujo reverso. La capacidad de mezcla es pobre y por lo tanto se tiene una llama muy alargada con combustión inestable.
- Números de Swirl superiores a valor crítico ($S > S_c$) se consideran importantes ya que la presión a lo largo del eje es capaz de invertir el flujo en el eje de la cámara generando vórtices toroidales que succionan una masa importante de mezcla. El tamaño de la zona de recirculación interior o IRZ puede caracterizarse por un punto de remanso en el eje del chorro aguas abajo de la tobera.

No está definido cuál es el valor del Swirl crítico (S_c) pues influyen las condiciones de contorno. Puede estar entre 0.4 y 0.6.

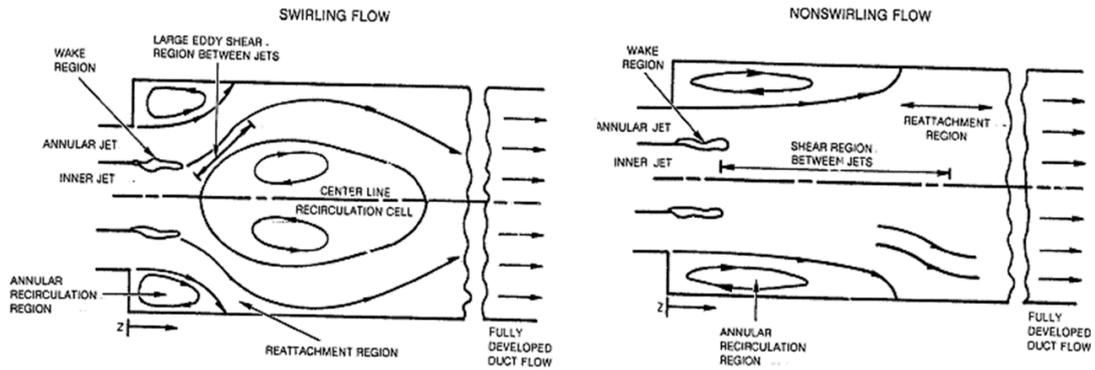


Figura 2-20 Patrón de flujo en función del número de swirl (Roback et al. 1983)

La forma de la zona de expansión brusca tiene influencia en el tamaño de las zonas de recirculación. Así el empleo de una tobera divergente o difusor puede aumentar, en gran medida, el tamaño de la zona de recirculación interior al mantener el número de Swirl del chorro. La tendencia a emplear difusores en turbinas de gas de aeronaves es cada vez más alta, ya que se obtiene un perfil de temperatura más estable y se reducen significativamente las pérdidas de presión. En Klein (1995), se realiza una revisión de diseños de una manera general, con los fenómenos de flujo en difusores de cámaras de combustión. Se muestran los problemas de diseño de difusores y se analizan varios tipos de difusores de cámaras de combustión (Figura 2-21). En González-Espinosa et al. (2013) se analizan varias configuraciones para difusores en quemadores de plantas de generación de energía eléctrica.

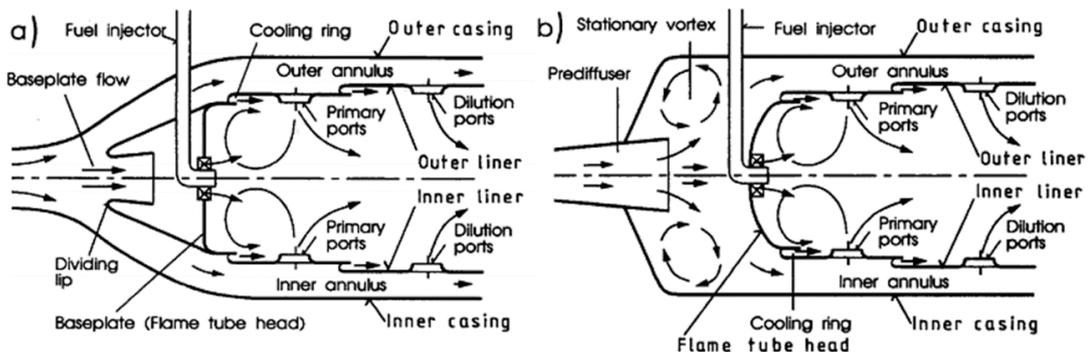


Figura 2-21 Tipos de difusores en cámaras de combustión de turbinas de gas. a) Faired Diffuser b) Dump Diffuser (Klein 1995)

2.4.5 Casos test de referencia

Numerosos casos de prueba experimentales han sido llevados a cabo en flujos rotantes en quemadores. Uno de los más conocidos es el experimento de Roback et al. (1983) que se llevó a cabo como parte de un programa de la NASA (Figura 2-22). Posteriormente Nejad et al. (1989) realizaron un análisis similar con una única tobera y una expansión brusca (Figura 2-22) para números de swirl comprendidos entre 0.3 y 0.5 mientras que So et al. (1984) analizó el flujo rotante con dos toberas y sin expansión brusca (Figura 2-22) para altos números de swirl (2.2 aproximadamente). En la actualidad se sigue trabajando en la caracterización numérica y experimental de este tipo de flujos, debido a su gran importancia industrial.

Se ha seleccionado el trabajo de Palm et al (2005) como segundo caso de referencia, ya que las simulaciones experimentales son similares a las del caso test de Roback et al. (1983). Además este trabajo dispone de resultados experimentales para números swirl distintos (0.6 y 1.2).

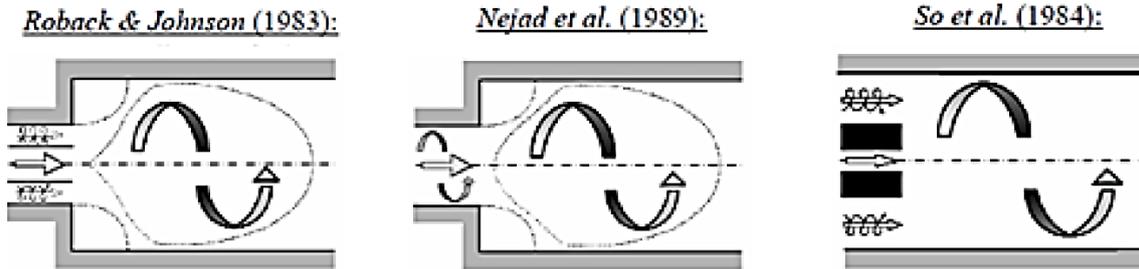


Figura 2-22 Casos test de referencia en flujos rotantes en quemadores (Palm, 2006)

El modelo geométrico empleado para el quemador será el correspondiente al caso test clásico empleado por Roback et al. (1983), debido a que este tipo de problema tiene una amplia bibliografía en el apartado experimental que permitirá validar los resultados numéricos para flujo isoterma.

Se trata de una geometría muy sencilla que se compone de dos toberas coaxiales, una interior y otra exterior que descargan a una cámara de combustión caracterizada por una expansión brusca.

Para generar swirl o giro se emplean unas aletas directrices en la tobera exterior con un ángulo de 30°. Este generador de swirl genera vórtices libres. Esto quiere decir que cada partícula se mueve con velocidad tangencial inversamente proporcional con la distancia al centro de rotación y sin velocidad radial.

Las toberas tienen un diámetro exterior de 59 y 25 mm respectivamente. El espesor de la más tobera interior es de 3 mm. No es necesario definir el espesor de la tobera exterior, puesto que se simula la dinámica del fluido dentro del quemador y no se considerarán pérdidas de calor.

La Figura 2-23 muestra la notación de las dimensiones de las toberas coaxiales y la cámara de combustión propuestas por Roback et al. (1983). En la Figura 2-24 se muestra el generador de swirl que se emplea. La Tabla 2-1 indica las condiciones de funcionamiento usadas por dos fuentes bibliográficas usadas para validar el modelo.

Como principales condiciones de funcionamiento del quemador se puede citar que el número de Swirl es 0.45 y que la velocidad de la tobera exterior es 1.52 m/s mientras que la de la tobera interior es 0.66 m/s.

De forma adicional se emplearán los resultados experimentales documentados en Palm et al (2005) y Palm (2006) y obtenidos en la Universidad de Darmstadt, Alemania en el departamento de Mecánica de Fluidos y Aerodinámica, para contrastar los resultados numéricos obtenidos para números de swirl de 0.6 y 1.2. Los resultados experimentales corresponden a las mediciones realizadas con una combinación de técnicas laser velocimeter (LV) y laser induced fluorescence (LIF) se emplearon para

obtener los perfiles de velocidades medias y fluctuantes. También se emplearon técnicas para realizar análisis transitorio.

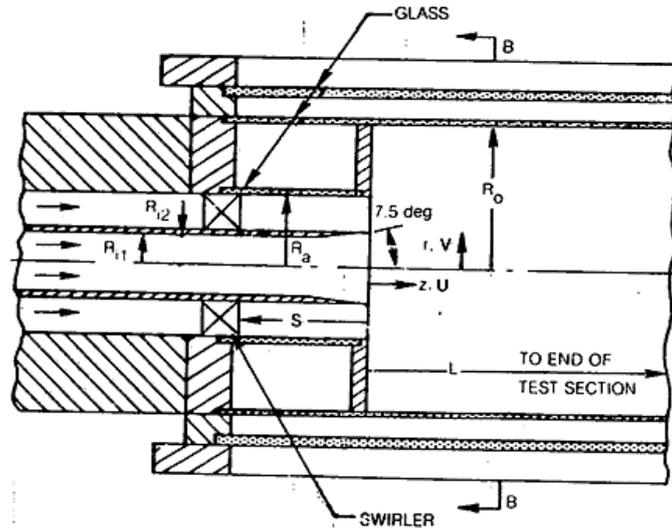


Figura 2-23 Esquema con las dimensiones más significativas del experimento de Roback y Johnson. (Roback et al. 1983)

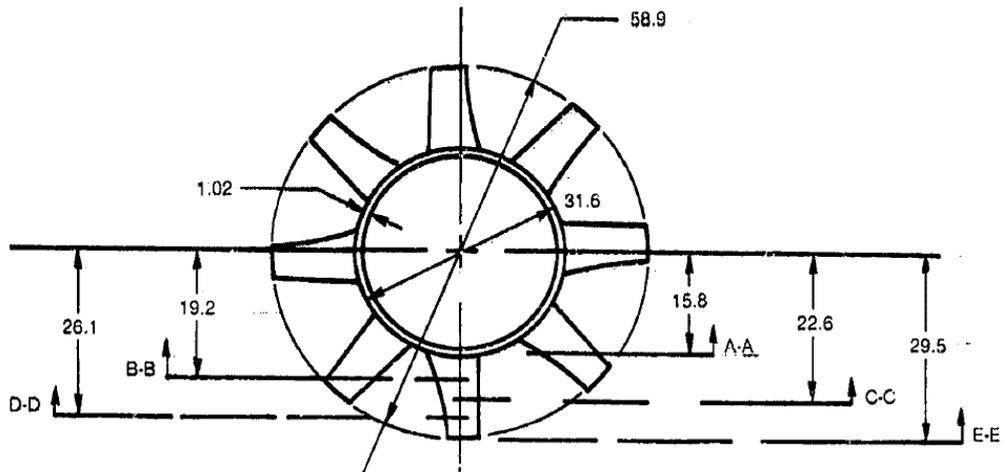


Figura 2-24 Esquema con las dimensiones más significativas del generador de swirl (Roback et al. 1983)

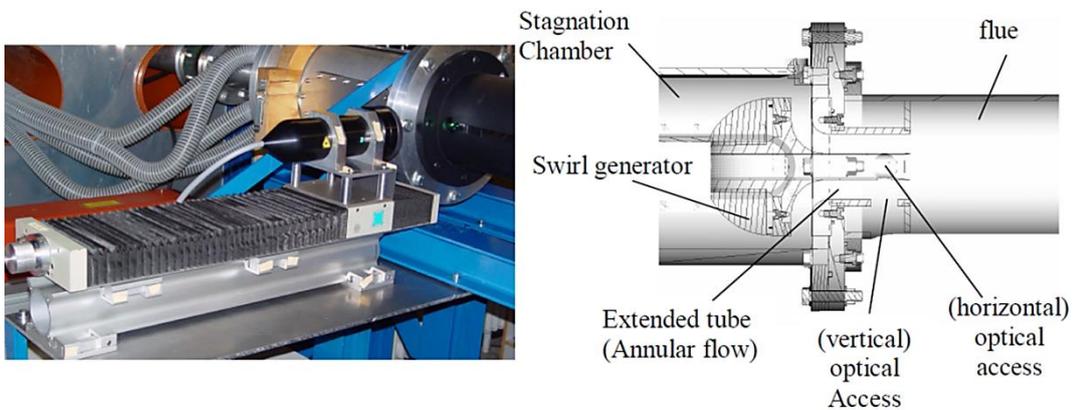


Figura 2-25 Esquema de la instalación experimental de medida. Palm (2005) y Palm (2006)

Tabla 2-1 Dimensiones de los casos test utilizados para validar (mm)

Característica	Test 1	Test 2
	Roback et al. (1983)	Palm et al. (2005)
R_{i1}	12.5	-
R_{i2}	15.3	-
R_m	22.4	-
R_a	29.5	-
R_o	61.0	-
S_s	51	-
L	1016	-
Ratio expansión en área	4	-
Ratio expansión en diámetro	2.0678	2
Swirl	0.45	0.6/1.2
Q_{an}/Q_{cn}	9.377	10
v_{an}	1.52	-
v_{cn}	0.66	-
v_{an}/v_f	5.2855	4.4
v_{cn}/v_f	2.295	2.7

2.4.6 Mezclado turbulento

Se ha mostrado anteriormente la importancia de un buen mezclado. Para caracterizar el mezclado se suele evaluar la eficiencia de la macromezcla. La macromezcla hace referencia a la convección a gran escala y puede ser analizada mediante métodos como las distribuciones de tiempo de residencia García (2007) y las edades del fluido Parra (2006).

Los métodos de distribución del tiempo de residencia (RTD, Residence Time Distribution) consisten en la inyección en la entrada un trazador y el registro de las partículas a la salida obteniendo el histograma del tiempo que dicho trazador tarda en salir del quemador. Existe mucha documentación sobre distribución del tiempo de residencia ya que las medidas experimentales no tienen excesiva complejidad. Este método detecta la presencia de recirculaciones, zonas muertas o la desviación de las condiciones normales de operación aunque no es capaz de localizar donde se originan las citadas zonas de mezclado deficiente.

Los métodos basados en las edades del fluido consisten en determinar la edad media local del fluido experimental o numéricamente. La edad del fluido se relaciona con el tiempo que permanece éste dentro del recinto a considerar. En este último caso es necesario resolver una ecuación de conservación afectada por el transporte convectivo y difusivo, siendo el término fuente la unidad. El coeficiente de transporte difusivo viene dado por la suma de las difusividades másicas laminar y turbulenta Sandberg (1981). La ventaja de este método respecto al de las RTD es que permite localizar las zonas de mezclado deficiente.

Además de una buena macromezcla (convección turbulenta) para que el mezclado y la combustión sean adecuados, es necesario un requisito adicional, una buena micromezcla. De forma análoga para tener una micromezcla adecuada, es requisito

tener una buena mezcla en la macroescala y en la mesoescala (difusión turbulenta) para disminuir la falta de homogeneidad de las propiedades.

Como herramienta de análisis de la micromezcla en Baldyga (1989) se proponen tres mecanismos basados en la convección inercial, la convección viscosa y la difusión molecular. Fernandez-Moguel, (2009) implementa dicho modelo mediante UDF. La convección inercial tiene que ver con la desintegración de los grandes torbellinos. La convección viscosa hace referencia a la formación de estructuras laminares y la difusión molecular se relaciona con la destrucción de las estructuras laminares. Así pues, asumiendo que la varianza de la concentración de una especie está afectada por estas tres contribuciones, Baldyga propone resolver tres ecuaciones adicionales acopladas, una para cada tasa de cambio de cada contribución. La micromezcla será perfecta si la varianza de la concentración se hace nula, y si adquiere un valor constante en el tiempo entonces no existe mezcla alguna a nivel microscópico. Este método ha sido aplicado por Henczka (2005) emplea esta metodología para caracterizar la micromezcla.

2.5 Ecuaciones de conservación para flujos reactivos

Se describen las ecuaciones de conservación para flujos reactivos en forma diferencial conservativa con el objeto de introducir los conceptos necesarios para los modelos de combustión.

2.5.1 Conservación de la masa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla(\rho \bar{v}) = 0 \quad 2-13$$

Donde \bar{v} es la velocidad y ρ la densidad de la mezcla.

2.5.2 Conservación de la cantidad de movimiento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) + \nabla(\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla P + \nabla \bar{\tau}' + \rho \bar{f}_m \quad 2-14$$

Donde P representa la presión, $\bar{\tau}'$ el tensor de esfuerzos viscosos y \bar{f}_m las fuerzas másicas. Se detallarán en profundidad las ecuaciones de Navier-Stokes en el capítulo 3. Además se realizará un estudio detallado de la turbulencia y de las formas de resolverla o tratarla.

El tensor de esfuerzos viscosos para un fluido newtoniano (en general en combustión se trabaja con fluidos newtonianos) es:

$$\bar{\tau}' = \mu(\bar{\nabla} \bar{v} + \bar{\nabla} \bar{v}^T) + (\mu_v - \frac{2}{3}\mu)\bar{\nabla} \cdot \bar{v} \bar{I} \quad 2-15$$

2.5.3 Conservación de la energía

La ecuación de la energía puede escribirse como 2-16.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(u + \frac{1}{2} |\bar{v}|^2 \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \bar{v} \left(u + \frac{1}{2} |\bar{v}|^2 \right) \right] = \nabla \cdot (\bar{\tau} \cdot \bar{v}) - \nabla \cdot (P \cdot \bar{v}) + \rho \bar{v} \bar{f}_m - \nabla J_h + \dot{Q}_r + \dot{Q}_q \quad 2-16$$

donde J_h es el flujo difusivo de calor, Q_r representa el intercambio de calor por radiación y Q_q es el calor generado por reacción química, u es la energía interna.

Asumiendo las hipótesis:

- Flujo incompresible ($M < 0.3$)
- Combustión no premezclada
- Los coeficientes de difusión de las especies químicas y el de la entalpía son iguales.
- Número de Lewis=1
- c_p constante
- Variaciones de presión pequeñas es decir no se consideran ondas de choque o detonaciones.
- Sin calor por radiación

El flujo difusivo de calor también tiene tres componentes, por gradiente de temperatura o ley de Fourier, por gradiente de concentración que se conoce como efecto Dufour y por flujo difusivo de especies químicas. Se suele despreciar de forma análoga a lo anterior los dos últimos términos Williams (1985).

La energía potencial puede despreciarse frente a la energía interna. La ecuación se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(u) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} u) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q_q + \phi_v \quad 2-17$$

2.5.4 Conservación de las especies

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho Y_i] + \nabla \cdot [\rho \bar{v} Y_i] = -\nabla \cdot (J_i) + M_i w_i \quad 2-18$$

Siendo Y_i la fracción másica de la especie i en un sistema con varias especies, J_i el flujo difusivo de la especie i y w_i la generación o destrucción molar de la especie i .

El flujo difusivo de la especie i tiene tres componentes, el debido al gradiente de especies, de temperatura que se conoce como efecto Soret y de presión. Según Williams (1985) se pueden despreciar los dos últimos en combustión por lo que se puede expresar el término difusivo como la ley de Fick.

$$J_i = \rho D_i \nabla Y_i \quad 2-19$$

2.5.5 Ecuación de estado

Suponiendo una mezcla de gases perfectos, la ecuación de estado sería la siguiente

$$\frac{P}{\rho} = R_g T = RT \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \quad 2-20$$

En resumen las ecuaciones a resolver para flujos reactivos serían:

- Ecuaciones de conservación de la masa y de las especies
- Ecuación de conservación de cantidad de movimiento
- Ecuación de la energía
- Ecuación de estado

Las incógnitas serían la densidad y las fracciones másicas menos 1, la velocidad con sus tres componentes la presión y la temperatura.

2.5.6 Cinética química de las reacciones

Si se considera una reacción química del tipo:



Siendo i cada componente o especie química, A el elemento químico de la reacción, v su coeficiente estequiométrico y los superíndices ' y '' hacen referencia a los reactivos y productos respectivamente y los superíndices F y B al sentido de la reacción directa (F) e inversa (B).

La constante de reacción directa e inversa pueden expresarse según la ley de Arrhenius de la siguiente forma para reacciones irreversibles:

$$k_r^F = A_r T^\beta e^{\left(\frac{-E_r}{RT}\right)} \quad 2-22$$

$$k_r^B = k_r^F / k_r^E \quad 2-23$$

Siendo la k_r^E la constante de equilibrio de la reacción.

La tasa de reacción química w_i viene dada por:

$$w_i = \sum_{r=1}^R (v_{i,r}'' - v_{i,r}') \dot{w}_{i,r} \quad 2-24$$

Donde $\dot{w}_{i,r}$ es la velocidad de reacción de la especie i en la reacción r y se calcula de la siguiente forma.

$$\dot{w}_{i,r} = k_r^F \prod_{i=1}^N [C_{i,r}]^{n_{i,r}'} - k_r^B \prod_{i=1}^N [C_{i,r}]^{n_{i,r}''} \quad 2-25$$

Se tiene que para calcular el término fuente de la ecuación de conservación de la especie i , en el caso de tener reacción química es necesario resolver tantas ecuaciones diferenciales no lineales, acopladas y rígidas como número de reacciones consideradas.

2.5.7 Ecuación conservación fracción de mezcla

Empleando la formulación de Schwab-Zeldovich, Burke y Schumann desarrollaron las ecuaciones conservación para la fracción de mezcla utilizando el concepto de química rápida que se comentó en 2.2.4.1. Desarrollos clásicos para la deducción de la ecuación de conservación de mezcla son Williams (1985), Kuo (1986), Warnatz et al. (2006) y Glassman et al. (2008).

Se crean unos escalares pasivos (Z_i) que no son modificados por la reacción química (variables Schwab-Zeldovich).

$$F + O \rightarrow P \quad 2-26$$

$$Z_1 = Y_F - \frac{Y_O}{r} \quad 2-27$$

$$Z_2 = Y_F + \frac{Y_P}{r+1} \quad 2-28$$

$$Z_3 = \frac{Y_O}{r} + \frac{Y_P}{r+1} \quad 2-29$$

$$Z_4 = Y_F + \frac{c_p T}{Q} \quad 2-30$$

$$r = \left. \frac{gO_2}{gF} \right|_{Esteq.} \quad 2-31$$

Todas las variables (Z_i) satisfacen una ecuación de conservación en la que no hay reacción química.

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{v} \cdot Z) = \nabla(\rho D \nabla Z) \quad 2-32$$

Para obtener las variables Schwab-Zeldovich se asume reacción infinitamente rápida, por lo que en la llama coexisten combustible y oxidante.

Si se multiplica y suma cualquier variable por una constante se sigue satisfaciendo la ecuación anterior. Mediante esta estrategia se consigue que la fracción de mezcla tome el valor unidad en la zona de combustible puro y cero en la del oxidante puro.

Se define por tanto la fracción de mezcla (Se asume la hipótesis de número de Lewis=1) como:

$$\xi = \frac{Z_i - Z_{i,0}}{Z_{i,F} - Z_{i,0}} \quad 2-33$$

$$\frac{\partial(\rho \xi)}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{v} \cdot \xi) = \nabla(\rho D \nabla \xi) \quad 2-34$$

2.6 Simulación de la combustión

Existen muchos criterios para clasificar la combustión. Algunos modelos coinciden con la propia clasificación.

De forma general se pueden clasificar los modelos simular la combustión en premezclados y no premezclados en referencia a la configuración.

Otro criterio que permite clasificar los modelos de combustión atiende al número de Damköhler, es decir, a la relación entre las escalas de la turbulencia y a las escalas de la cinética química. Si las escalas de la turbulencia son dominantes frente a las de la cinética química se habla de química rápida. Si ocurre de forma inversa se trata de química lenta o “*finite rate*”

Una tendencia importante es localizar el frente reactivo, por lo que en llamas no premezcladas, se utiliza la fracción de mezcla (ξ) que sirve para diferenciar zonas de oxidante puro o combustible puro.

Para combustión premezcladas la principal tendencia de simulación consiste en emplear una variable de progreso que indica si los gases se han reaccionado o no.

La resolución de la cinética química puede realizarse de forma detallada con reacciones en cientos de pasos que complican enormemente la resolución de cada reacción o de forma reducida con reacciones generales.

De forma general los modelos pueden clasificarse en:

- Modelos basados en la descripción de la química en términos del mezclado turbulento, limitando la tasa de reacción en función de parámetros asociados a la turbulencia del flujo. Aquí se suelen incluir los métodos que emplean química rápida como Eddy Dissipation Model (EDM)
- Modelos basados en la determinación de la estructura geométrica de la llama. En esta categoría se encuentra el modelado con *flamelets* que describen el frente de reacción por medio de iso-superficies.
- Modelos que emplean técnicas estadísticas: Aquí se encuentran los modelos de función de densidad de probabilidad o PDF y utilizan resultados de llamas tabuladas a priori.

2.6.1 Clasificación de los modelos de combustión

Una clasificación clara no es sencilla puesto que se utilizan combinaciones de estrategias para solucionar diversos fenómenos de la combustión.

En la Tabla 2-2 se muestra una posible clasificación de los modelos de combustión atendiendo a la configuración del flujo y a la velocidad de química. El modelo PDF también es aplicable a química rápida.

Tabla 2-2 Clasificación de los modelos de combustión

		Configuración de flujo		
		Premezclado	No premezclado	Parcialmente premezclado
Tipo de química	Rápida Da >> 1	Eddy Dissipation Model (ED) Species transport		
		Premixed combustion model (Variable de progreso de reacción)	Non-premixed combustion model (Fracción de mezcla)	Partially premixed model (Variable de progreso de reacción + Fracción de mezcla)
		Eddy Dissipation (ED)/Finite Rate		
	Lenta Da << 1	Laminar finite-rate model		
		Eddy dissipation concept Model (EDC)		
		Composition PDF transport Model		
		-	Laminar flamelet model Steady/Unsteady	

2.6.2 The Laminar Finite-Rate Model

El efecto de la turbulencia en la combustión se desprecia y la tasa de reacción viene determinada por la expresión de Arrhenius. El modelo de combustión se basa en las ecuaciones de la cinética química (ver 2.5.6). Se puede tratar mediante reacciones globales o semidetalladas.

2.6.3 Eddy Dissipation (ED)

El modelo Eddy Dissipation considera que las velocidades de reacción están dominadas por la turbulencia. El coste computacional es muy bajo ya que se eliminan una gran cantidad de ecuaciones de cinética química.

La tasa de generación molar de la especie i , w_i , viene dada por el mínimo valor entre las dos expresiones siguientes:

$$\dot{w}_{i,r} = v'_{i,r} M_i A \rho \frac{\epsilon}{\kappa_{Re\ act}} \min \left(\frac{Y_i}{v'_{i,r} M_i} \right) \tag{2-35}$$

$$\dot{w}_{i,r} = v'_{i,r} M_i A B \rho \frac{\epsilon}{\kappa} \frac{\sum Y_i^{Prod.}}{\sum_i v'_{i,r} M_i} \tag{2-36}$$

Siendo A y B constantes empíricas.

La tasa de reacción está gobernada por la turbulencia (k/ϵ). Por lo tanto, existirá combustión siempre que la turbulencia esté presente ($k/\epsilon > 0$). No es necesario un iniciador de la combustión. Esta hipótesis es aceptable para configuraciones no

premezcladas pero no en caso de configuraciones premezcladas ya que los reactantes se pueden quemar aguas arriba de la estabilización de la llama (Ansys, 2012).

El coste computacional del modelo Eddy Dissipation es significativamente bajo, debido a que se evita el cálculo de las tasas de reacción de Arrhenius, pero a cambio, se la combustión se simplifica.

2.6.4 Eddy Dissipation Concept (EDC)

El modelo Eddy Dissipation Concept (EDC) consiste en una extensión del modelo Eddy Dissipation. Este modelo considera mecanismos de reacción detallados además del modelado del flujo turbulento. La principal característica es que este modelo asume que las reacciones tienen lugar en pequeñas estructuras turbulentas llamadas *fine scales* (ξ^*) (Ansys, 2012). El tamaño de estas *fine scales* se puede calcular según 2-37.

$$\dot{w}_{i,r} = v_{i,r} M_i A B \rho \tau_{sgs}^{-1} \frac{\sum_i Y_i}{\sum_i v_{i,r} M_i} \quad 2-37$$

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\mu \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{1/4} \quad 2-38$$

La escala de tiempos de las reacciones que tienen lugar viene dada por la ecuación 2-39.

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\mu}{\rho \varepsilon} \right)^{1/2} \quad 2-39$$

El término fuente $\dot{w}_{i,r}$ presentado en la ecuación de conservación de las especies, toma la forma dada por la ecuación 2-40.

$$\dot{w}_{i,r} = \frac{\rho (\xi^*)^2}{\tau^* [1 - (\xi^*)^3]} (Y_i^* - Y_i) \quad 2-40$$

Y_i^* es la fracción másica de las *fine scales* de la especie i tras la reacción a lo largo del tiempo τ^* .

El modelo EDC considera las reacciones químicas que tienen lugar en la combustión y la interacción de éstas con los fenómenos turbulentos. El coste computacional de la resolución de la cinética química es muy alto.

2.6.5 Eddy Dissipation (ED)/Finite Rate

En los modelos que se asume química rápida, la velocidad de reacción química viene dada por la escala de tiempo de mezclado. La combustión se da cuando la

turbulencia está presente, y no se requiere una fuente de ignición para iniciar la combustión. Esto es generalmente aceptable para las llamas no premezcladas, pero en llamas premezcladas, los reactivos se pueden quemar justo al entrar en el dominio computacional lo que no sería realista (Ansys, 2012).

Para evitar esto, existe una modificación del modelo ED que implementa las ecuaciones Arrhenius. La velocidad de reacción neta se toma como el mínimo de estas dos tasas por lo que la tasa de Arrhenius actúa como mecanismo de ignición. Una vez que esto sucede, suele dominar la tasa de disipación del modelo ED sobre la del modelo *Finite rate*.

Por lo tanto el modelo Eddy Dissipation / Finite Rate tiene en cuenta que la tasa de reacción de la especie i debido a la reacción r , viene dada por el mínimo valor entre la escala turbulenta y la escala química.

2.6.6 Flamelets

La teoría de flamelets surgió en los años 70 y aplica al modelado de la combustión turbulenta en la que las reacciones químicas se producen en un ritmo tal que la llama se compone de pequeñas y finas láminas (*flamelets*) laminares reactivas, más delgadas que la escala más pequeña del flujo (Kolmogorov) y moldeadas por el flujo turbulento por lo que podría considerarse no reactivo para números de Damköhler grandes.

- El desarrollo teórico de los modelos de flamelets consiste en el cambio de coordenadas en el frente de reacción y el uso de la fracción de mezcla. No se presenta el desarrollo teórico del modelo de flamelet laminar. Dicho desarrollo se puede encontrar en Peters (1988), Kuo (1986) y Williams (1985).
- Existen dos variantes para los modelos *flamelets* que se diferencian en la velocidad de formación de las especies de productos (Steady Flamelet Difusión y Unsteady Difusión Flamelet).

Los modelos de *flamelets* son adecuados cuando se dan fenómenos de no equilibrio.

2.6.7 Análisis estadístico-PDF

Se ha descrito la ecuación de conservación para la fracción mezcla, ξ en el apartado 2.5.7. Sin embargo, en la ecuación de conservación aparecen la velocidad y densidad por lo que en la mayoría de los flujos, la turbulencia afecta a la combustión y por tanto es necesario incluir dichos efectos mediante la ecuación de conservación de la fracción de mezcla.

Aplicando a la ecuación de conservación de fracción de mezcla técnicas similares estadísticas en flujos turbulentos se reescriben las ecuaciones de conservación para la fracción de mezcla media y para su fluctuación.

Las ecuaciones de transporte para la fracción de mezcla media ($\bar{\xi}$) y la varianza de ésta ($\bar{\xi}^2$) en un flujo turbulento (Ansys, 2012) están descritas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{\xi}) + \nabla(\rho \vec{v} \cdot \bar{\xi}) = \nabla \left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} \nabla \bar{\xi} \right) \quad 2-41$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{\xi}^2) + \nabla(\rho \vec{v} \cdot \bar{\xi}^2) = \nabla \left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} \nabla \bar{\xi}^2 \right) + C_g \mu_T (\nabla \bar{\xi})^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \bar{\xi}^2 \quad 2-42$$

Donde σ_t , C_g y C_d son constantes cuyos valores son 0.7, 2.86 y 2 respectivamente.

Considerando la hipótesis de equilibrio químico, ya que la química es rápida mediante el modelado con las ecuaciones de la fracción de mezcla se puede conocer todos los escalares termoquímicos como las especies, densidad y temperatura ya que únicamente dependen de ésta.

Basándose en lo anterior, en un flujo reactivo con química rápida se podría resolver el problema con 8 ecuaciones y 8 incógnitas. Sería necesario resolver las ecuaciones de conservación de la masa, de cantidad de movimiento, de la energía cinética turbulenta, de la disipación de la energía cinética turbulenta, de la fracción de mezcla media, la varianza de la fracción de mezcla y la ecuación de estado para obtener la presión, las tres componentes de la velocidad la energía cinética turbulenta, la disipación de la energía cinética turbulenta, la composición y la temperatura. La densidad se obtendría de la ecuación de estado en caso de que las variaciones de presión sean pequeñas. Si la radiación fuera importante sería necesario resolver la ecuación de la energía.

Se obtiene por lo tanto un modelo que permite resolver los efectos de la cinética química en llamas turbulentas.

Debido a que la predicción de los valores medios y la varianza de la fracción de mezcla están relacionada con los valores instantáneos, el modelo de interacción turbulencia-química es necesario. El concepto de función de densidad de probabilidad o PDF permite relacionar los escalares (θ_i) instantáneos y los promediados para la fracción de mezcla media y su varianza (Ansys, 2012).

$$\bar{\theta}_i = \int_0^1 P(\xi) \theta_i(\xi) d\xi \quad 2-43$$

La probabilidad de la fracción de mezcla o $P(\xi)$ puede comprenderse como la fracción del tiempo (τ_i) que el fluido pasa en el estado ξ .

Comprender este concepto es más sencillo mediante una formulación gráfica. La Figura 2-26 muestra una descripción gráfica de la función de densidad de probabilidad. Se representa la evolución temporal de la fracción de mezcla en un punto del flujo (derecha) y la función de densidad de probabilidad de la fracción de mezcla (izquierda). La fluctuación de ξ pasa un tiempo τ en el área $\Delta\xi$, de modo que $P(\xi)$ toma tales valores para que el área bajo la curva en $\Delta\xi$ sea igual a al tiempo que ξ pasa en dicho área.

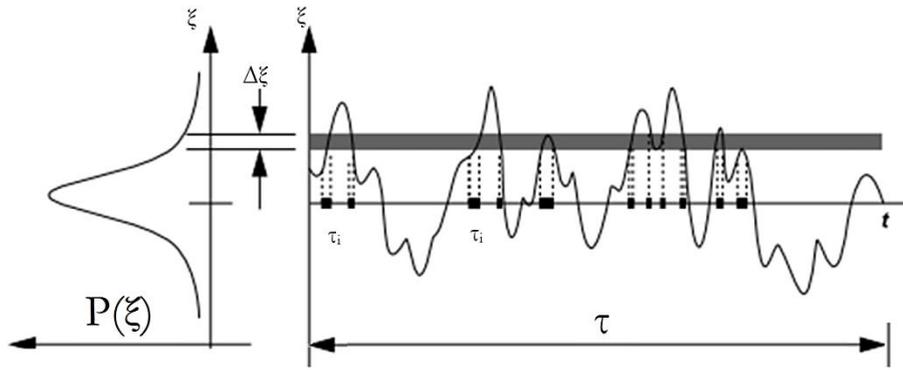


Figura 2-26 Ejemplo de una función densidad de probabilidad. (ANSYS, 2012)

Si se formula de forma matemática se tiene que:

$$P(\xi)\Delta\xi = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_i \tau_i \tag{2-44}$$

En la práctica $P(\xi)$ es desconocida por lo que tiene que ser modelada con una función matemática que aproxime a los datos que se observan experimentalmente.

Las funciones estadísticas más importantes para la función de densidad de probabilidad suelen ser la doble delta que es muy sencilla de calcular mientras que la función β que suele ser la más usada debido a su buen ajuste con dos parámetros a datos experimentales (Ansys, 2012).

$$P(\xi) = \begin{cases} 0.5 & \xi = \bar{\xi} - \sqrt{\xi^{12}} \\ 0.5 & \xi = \bar{\xi} + \sqrt{\xi^{12}} \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \tag{2-45}$$

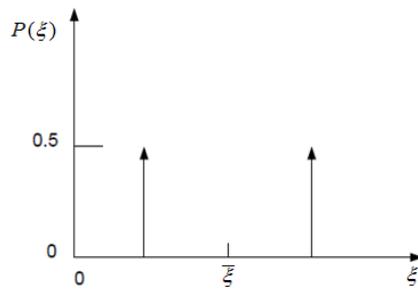


Figura 2-27 Ejemplo de la función doble delta como función PDF

La función β y sus parámetros se muestran en las ecuaciones 2-46, 2-47 y 2-48.

$$P(\xi) = \frac{\xi^{\alpha-1}(1-\xi)^{\beta-1}}{\int \xi^{\alpha-1}(1-\xi)^{\beta-1} d\xi} \tag{2-46}$$

$$\alpha = \bar{\xi} \left(\frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi^{12}} - 1 \right) \tag{2-47}$$

$$\beta = (1-\bar{\xi}) \left(\frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi^{12}} - 1 \right) \tag{2-48}$$

Los cálculos de equilibrio referentes a la cinética química se pueden obtener previamente para casos de combustión particulares y se pueden almacenar en tablas. Durante las simulaciones se resuelven las ecuaciones de conservación para la fracción de mezcla y la varianza y se emplea la función PDF con las tablas precalculadas para la cinética química.

Se puede ahorrar mucho tiempo de cálculo almacenando estas integrales una vez y recuperándolas en una tabla en las que se buscan los valores de los escalares necesitados en cada punto.

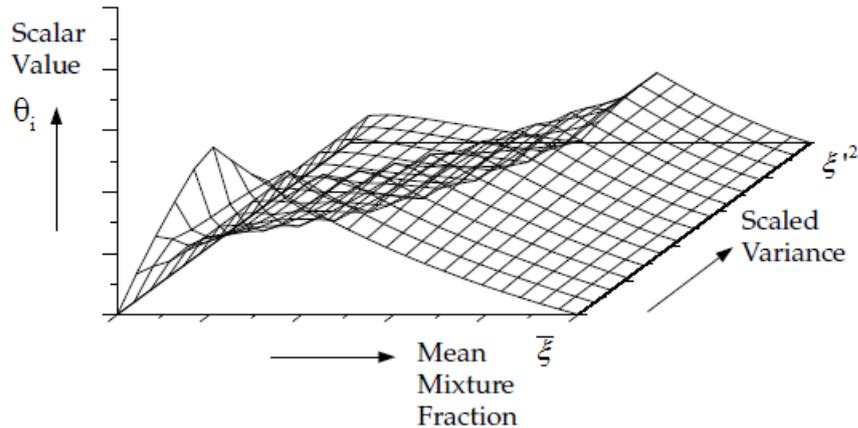


Figura 2-28 Representación visual de la tabla de búsqueda de escalares en el modelo PDF (Ansys, 2012).

La Figura 2-28 ilustra el concepto de tablas PDF en las que se pueden obtener media valores medios de la fracción másica, densidad o temperatura en cada punto como función de la media de la fracción de mezcla y de la varianza de la fracción de mezcla.

La gran ventaja del modelo PDF es la predicción de la formación de especies intermedias sin resolver la cinética química. Se asume la hipótesis de equilibrio, fracción de mezcla simple y que no existen pérdidas de calor en la formulación descrita anteriormente.

Existen extensiones del modelo para no adiabático y para varias entradas secundarias de combustible.

2.7 Análisis en el dominio de la frecuencia

El diseño de quemadores de flujo rotante se basa en una buena aerodinámica y un buen mezclado para tener una adecuada estabilidad en la llama. La estabilidad de la llama se puede ver afectada por fenómenos transitorios, fluctuación de la presión y fuentes acústicas entre otros. El análisis de la estabilidad de la llama pasa por el acoplamiento de fenómenos térmicos, fluidos y acústicos. La inestabilidad de la llama puede extinguir la combustión o generar pulsaciones que pueden dañar seriamente los equipos.

Por lo anterior es necesario el análisis en el dominio de la frecuencia. Así se pueden encontrar las frecuencias naturales.

El análisis POD o proper orthogonal decomposition es una técnica avanzada de análisis de datos basada en el contexto de la teoría de probabilidad aunque ha sido desarrollada de forma extensa como herramienta en mecánica de fluidos para reducir el orden de modelos y otros sistemas descritos por ecuaciones en derivadas parciales. En mecánica de fluidos Lumley (1981) y Sirovich et al. (1987) desarrollaron este método para el estudio de la teoría de capa límite turbulenta. Una revisión detallada del estado del arte sobre POD se puede ver en Gordeyev (2000) y Caux-Brisebois et al. (2014). Algunos artículos sobre análisis POD en combustión en flujos rotantes son Duwig et al. (2005), Duwig et al. (2007), Szasz et al. (2006) y Szasz et al. (2008).

El análisis en el dominio de la frecuencia permite describir características del flujo y estructuras coherentes como el PVC o *precessing vortex core*.

Las estructuras coherentes que se encuentran en el flujo rotante en quemadores son las recirculaciones interior y exterior (IRZ y ORZ respectivamente) y el PVC que es una estructura espiral que se desarrolla en el interior de la zona de recirculación interior. Se muestra en Schildmacher et al. (2006) que el PVC está ligado a inestabilidades térmicas acústicas y de fluidos (Figura 2-29).

Se muestra una revisión de PVC en sistemas de combustión gobernados por giro en Syred (2006).

EL PVC se puede describir en términos de St y S en flujos rotantes isoterms confinados aunque en el caso reactivo el comportamiento del PVC es más complejo pues depende de la forma de entrada del combustible, la mezcla y el nivel de confinamiento. En las tendencias actuales se trabaja con bajo swirl por lo que las inestabilidades son mucho más importantes al estar más presentes.

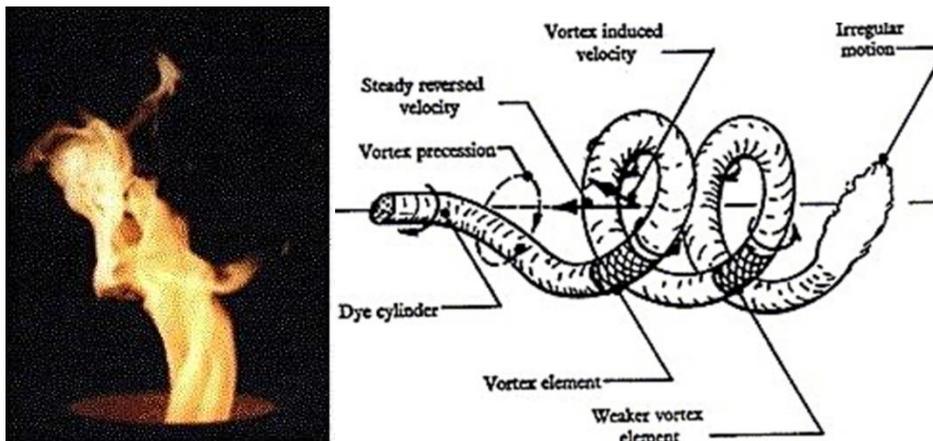


Figura 2-29 Visualización del PVC en combustión premezclada en un quemador de flujo rotante (izq.) Representación esquemática del PVC (Syred 2006).

La transformada rápida de Fourier o FFT se utiliza también para el análisis espectral de las inestabilidades y oscilaciones del flujo. La metodología para POD y FFT se mostrará en el capítulo 5.

2.8 Conclusiones

Este capítulo trata sobre una revisión sobre los aspectos más importantes de la combustión en flujos reactivos. Se realiza una clasificación de la combustión, los parámetros más significativos y se muestran las principales características y tratamientos asintóticos de la combustión premezclada y no premezclada, detallándose más esta última.

Se analizan los métodos de estabilización de llama actuales y se concluye que ésta es fundamental para garantizar en todo momento una mezcla uniforme.

Se analiza la combustión en flujos rotantes así como sus características, los casos experimentales de referencia y el mezclado turbulento.

El caso test de referencia se encuadra dentro de la combustión no premezclada, con un elevado número de Damköhler, por lo que se puede asumir reacción instantánea siendo el mecanismo de mezclado el que controla la reacción. Por lo tanto la primera parte de esta investigación se basará en el análisis de la aerodinámica y la caracterización del flujo de forma isoterma.

Se describen las ecuaciones de conservación para flujos reactivos en forma diferencial conservativa, con el objeto de introducir los conceptos necesarios para los modelos de combustión.

Se analizan y clasifican los principales modelos de simulación de la combustión atendiendo a la configuración del flujo o la velocidad de reacción. De forma general se pueden emplear modelos basados en la descripción del mezclado, de la determinación de la estructura geométrica de llama o modelos con técnicas estadísticas.

Puesto que la inestabilidad de la llama puede generar problemas muy importantes en los equipos, se presenta una breve introducción al análisis en el dominio de la frecuencia, con técnicas novedosas como el análisis POD o estructuras coherentes como el PVC.

La revisión bibliográfica permite seleccionar la metodología a utilizar en este trabajo.

2.9 Referencias

- [6]. Al-Abdeli, Y. M. and Masri, A.R. (2015). Review of Laboratory Swirl Burners and Experiments for Model Validation. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 12, vol. 69, pp. 178-196. ISSN 0894-1777.
- [7]. Ansys, (2012). *Ansys Fluent Theory Guide*, Release 14.5.
- [8]. Baldyga, J. (1989). Turbulent Mixer Model with Application to Homogeneous, Instantaneous Chemical Reactions. *Chemical Engineering Science*, vol. 44, no. 5, pp. 1175-1182. ISSN 0009-2509.
- [9]. Barrère, M. (1984). Modèles De Combustion Turbulente. *Rev. Générale de Thermique*. vol. 148, pp. 295-308.
- [10]. Borghi, R. (1985) On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames. *Recent Advances in the Aerospace's Sciences*, pp. 117-138.
- [11]. Buckmaster, J., Clavin, P., Liñan, A., Matalon, M., Peters, N., Sivashinsky. G. and Williams, F.A. (2005). *Combustion Theory and Modeling*. Proceedings of the Combustion Institute, 1, vol. 30, no. 1, pp. 1-19. ISSN 1540-7489.
- [12]. Buckmaster, J. D. y Ludford, G. S. S. (1982). *Theory of Laminar Flames*. 1st ed. Cambridge: Cambridge University Press. Cambridge Books Online.
- [13]. Burke, S. P. and Schumann, T. E. W. (1928) Diffusion Flames. *Industrial & Engineering Chemistry*, no. 10, pp. 998. ISSN - 0019-7866.
- [14]. Candel, S., Durox, D., Schuller, T., Darabiha, N., Hakim, L. Schmitt, T. (2013) *Advances in Combustion and Propulsion Applications*. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 0, vol. 40, pp. 87-106. ISSN 0997-7546.
- [15]. Caux-Brisebois, V., Steinberg, A.M. Arndt, C.M. and Meier, W. (2014). Thermo-Acoustic Velocity Coupling in a Swirl Stabilized Gas Turbine Model Combustor. *Combustion and Flame*, 12, vol. 161, no. 12, pp. 3166-3180. ISSN 0010-2180.
- [16]. Chan, C. K. Lau, K. S., Chin, W.K. and Cheng, R.K. (1992). Freely Propagating Open Premixed Turbulent Flames Stabilized by Swirl. *Symposium (International) on Combustion*, vol. 24, no. 1, pp. 511-518. ISSN 0082-0784.
- [17]. Cheng, R.K. (2006). *Experimental Database for Premixed Turbulent Flames*. Energy Technologies Area E.O. Lawrence Berkeley National Laboratory University of California, U.S. Department of Energy. [accessed Jul 20, 2015]. <http://energy.lbl.gov/aet/combustion/workshop/Database/flame-config.html>.
- [18]. Cheng, R.K., Yegian, D.T., Miyasato, M.M., Samuelesen, G.S., Benson, C.E., Pellizzari, R. and Loftus, P. (2000) Scaling and Development of Low-Swirl Burners for Low-Emission Furnaces and Boilers. *Proceedings of the Combustion Institute*, vol 28, pp. 1305–1313 ISBN 1540-7489.

- [19]. Chomiak, J., Gorczakowski, A., Parra, T. Jarosinski, J. (2007). Flame Kernel Growth in a Rotating Gas. *Combustion Science and Technology*, 12/31, vol. 180, no. 2, pp. 391-399. ISSN 0010-2202.
- [20]. Damkohler, G. (1947). The Effect of Turbulence on the Flame Velocity in a Gas Mixture. Washington, DC, United States, NASA Technical Report no. 20050009802.
- [21]. Dunn-Rankin, D. Barr, P. K. and Sawyer, R. F. (1988). Numerical and Experimental Study of “tulip” Flame Formation in a Closed Vessel. *Symposium (International) on Combustion*, vol. 21, no. 1, pp. 1291-1301. ISSN 0082-0784.
- [22]. Duquenne, A. M., Guiraud, P. and J., Bertrand. (1993). Swirl-Induced Improvement of Turbulent Mixing: Laser Study in a Jet-Stirred Tubular Reactor. *Chemical Engineering Science*, vol. 48, no. 22, pp. 3805-3812. ISSN 0009-2509.
- [23]. Duwig, C., Gherman, B. Mihaescu, M., Salewski, M. and Fuchs, L. (2005) Numerical Study of Thermo-Acoustic Waves Generation by a Swirling Flame using a New Approach Based on Large Eddy Simulation. *ASME Turbo Expo 2005: Power for Land, Sea, and Air*. Paper No.GT2005-68136 vol. 2, pp. 67-75. ISSN 0-7918-4725-X.
- [24]. Duwig, C. and Iudiciani, P. (2014). Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion in a Stagnation Point Reverse Flow Combustor using Detailed Chemistry. *Fuel*, 5/1, vol. 123, pp. 256-273. ISSN 0016-2361.
- [25]. Duwig, C., Fuchs, L., Lacarelle, A., Beutke, M. and Paschereit, C.O. (2007). Study of the Vortex Breakdown in a Conical Swirler using LDV, LES and POD. New York, NY: American Society of Mechanical Engineers, Paper No. GT2007-27006, pp. 1-10.
- [26]. Dwyer H. A., Hasegawa, T. (2000). A study of premixed flame propagation in a rotating tube. Abstracts of work-in-progress posters, 28th International Symposium on Combustion, Pittsburgh: The Combustion Institute, p. 18.
- [27]. Fernandez-Moguel, L. (2009), “Modelisation par CFD de la precipitation du carbonate de baryum en reacteur a lit fluidise”, PhD Thesis, National Polytechnic Institute of Lorraine, Nancy.
- [28]. Flagan, R.C. and Seinfeld, J. H. (1988) *Fundamentals of Air Pollution Engineering*. New Jersey: Prentice-Hall, CaltechBOOK. ISBN 0-13-332537-7.
- [29]. Friedlander S.K. and Keller K.H. (1963). The Structure of the Zone of Diffusion Controlled Reaction. *Chemical Engineering Science*, vol. 18, no. 6, pp. 365-375
- [30]. García-Villalba, M. and Fröhlich, J. (2006). LES of a Free Annular Swirling Jet – Dependence of Coherent Structures on a Pilot Jet and the Level of Swirl.

- International Journal of Heat and Fluid Flow, 10, vol. 27, no. 5, pp. 911-923. ISSN 0142-727X.
- [31]. García-Serna J., García-Verdugo E., Hyde J.R., Fraga-Dubreuil J., Yan C., Poliakov M., Cocero M.J. (2007). Modelling residence time distribution in chemical reactors: A novel generalised n-laminar model Application to supercritical CO₂ and subcritical water tubular reactors J. of Supercritical Fluids, vol. 41 pp. 82–91
- [32]. Giannadakis, A., Perrakis, K. and Panidis, T. (2008). A Swirling Jet Under the Influence of a Coaxial Flow. Experimental Thermal and Fluid Science, 9, vol. 32, no. 8, pp. 1548-1563. ISSN 0894-1777.
- [33]. Glassman, I. and Yetter, R.A. N.G. (2008). Combustion (Fourth Edition). ed., Boston: Academic Press, 2015. Chapter 6 - Diffusion Flames, pp. 311-374. ISBN: 978-0-12-088573-2
- [34]. González-Espinosa, A., Lozano, A., García, J.A., Barreras, F. and Lincheta, E. (2013). Design Modification of the Air Diffuser in the Burners of a Fuel Oil Power Plant. Fuel, 9, vol. 111, pp. 280-288. ISSN 0016-2361.
- [35]. Gorczakowski, A., Zawadzki A., Jarosinski J. (2000). Combustion mechanism of flame propagation and extinction in a rotating cylindrical vessel. Combustion and Flame. vol.120, no 3, pp. 359–371.
- [36]. Gordeyev S. (2000). POD, LSE and Wavelet Decomposition: Literature Review. Department of Aerospace and Mechanical Engineering. University of Notre Dame, Notre Dame, IN
- [37]. Guo, B., Langrish, T.A. G. and Fletcher L. D. F. (2002). CFD Simulation of Precession in Sudden Pipe Expansion Flows with Low Inlet Swirl. Applied Mathematical Modelling, 1, vol. 26, no. 1, pp. 1-15. ISSN 0307-904X.
- [38]. Hanson, R. J., and Thomas, A. (1984). Flame development in swirling flows in closed vessels. Combustion and Flame, vol. 55, no.3, pp. 255-257.
- [39]. Henczka M., Baldyga J., Shekunov B. (2005). Particle formation by turbulent mixing with supercritical antisolvent Chemical Engineering Science vol. 60 pp. 2193-2201
- [40]. Ibrahim, S.M.A. and El-Mahallawy, F. M. (1985). The Structure of Turbulent Free Diffusion Flames. Combustion and Flame, vol. 60, no. 2, pp. 141-155.
- [41]. Ishizuka, S. (2002). Flame Propagation Along a Vortex Axis. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 28, no. 6, pp. 477-542. ISSN 0360-1285.
- [42]. Ishizuka, S., Motodamari, T. Shimokuri, D. (2007). Rapidly Mixed Combustion in a Tubular Flame Burner. Proceedings of the Combustion Institute, 1, vol. 31, no. 1, pp. 1085-1092. ISSN 1540-7489.

- [43]. Jarosinski J., Gorczakowski, A. (2006). The mechanism of laminar flame quenching under the action of centrifugal forces. *Combustion Science and Technology*, vol.178 pp. 1441-1456.
- [44]. Jones, W. P. and Whitelaw, J. H. (1982). Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review. *Combustion and Flame*, vol. 48, pp. 1-26. ISSN 0010-2180.
- [45]. Klein, A. (1995). Characteristics of Combustor Diffusers. *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 31, no. 3, pp. 171-271. ISSN 0376-0421.
- [46]. Kuo, K. (1986). *Principles of Combustion*. John Wiley & Sons, New York.
- [47]. Liñán, A. (1974). The Asymptotic Structure of Counterflow Diffusion Flames for Large Activation Energies. *Acta Astronautica*, vol. 1, no. 7-8, pp. 1007-1039.
- [48]. Liñán, A. and Williams, F. (1993) *Fundamental Aspects of Combustion*. Oxford University Press, ISBN 0195076265.
- [49]. Liñán, A., Vera, M. and Sánchez, A.L. (2015) Ignition, Liftoff, and Extinction of Gaseous Diffusion Flames. *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 47 pp. 293-314, ISSN 0066-4189.
- [50]. Littlejohn, D., Majeski, A.J., Tonse, S., Castaldini, C. and Cheng, R.K. (2002). Laboratory Investigation of an Ultralow NO_x Premixed Combustion Concept for Industrial Boilers. *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 1, pp. 1115-1121. ISSN 1540-7489.
- [51]. Lumley, J. L. (1981). Coherent structures in turbulence. *Transition and turbulence*, Proceedings of the Symposium on Transition and Turbulence in Fluids, Madison, WI, New York, Academic Press p. 215-242.
- [52]. Maciel, Y., Facciolo, L., Duwig, C., Fuch, L. and Henrik, A.P. (2008). Near-field dynamics of a turbulent round jet with moderate swirl. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 6, vol. 29, no. 3, pp. 675-686. ISSN 0142-727X.
- [53]. Margolin, A.D. and Karpov V. P. (1974). Flame propagation in an eddy combustion chamber. *Society of Automotive Engineers SAE Paper 741165*.
- [54]. Margolin, A. D. and Vasilik, N.R. (1983). Movement of a flame kernel in a rotating gas (in Russian). *Chemical Physics* 2, 1279.
- [55]. Nemoda, S., Bakić, V., Oka, S., Zivković, G. and Crnomarković, N. (2005). Experimental and Numerical Investigation of Gaseous Fuel Combustion in Swirl Chamber. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 10, vol. 48, no. 21–22, pp. 4623-4632. ISSN 0017-9310.
- [56]. Norton, T. Smyth, K.C., Miller, J.H. and Smooke, M.D. (1993). Comparison of Experimental and Computed Species Concentration and Temperature Profiles

- in *Laminar, Two-Dimensional Methane/Air Diffusion Flames*. *Combustion Science and Technology*, vol. 90, no. 1-4, pp. 1-34. ISSN 0010-2202.
- [57]. Olivani, A., Solero, G., Cozzi, F. and Coghe, A. (2007). Near Field Flow Structure of Isothermal Swirling Flows and Reacting Non-Premixed Swirling Flames. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 4, vol. 31, no. 5, pp. 427-436. ISSN 0894-1777.
- [58]. Oystein, S. (2004). Experimental and theoretical studies of a Low NO_x swirl burner. PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology.
- [59]. Palm, R., Grundmann, S., Jakirlic, S., and Tropea, C. (2005). Experimental investigations and modelling of flow and turbulence in a swirl combustor. Proc. of 4th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Williamsburg, VA, USA.
- [60]. Palm, R. (2006). Experimentelle Untersuchung Der Strömung Und Vermischung in Einem Drallbrennermodell. PhD Thesis. Fachbereich Maschinenbau an der Technischen Universität Darmstadt.
- [61]. Parra M. T., Villafruela J. M., Castro F. and Méndez C. (2006). Numerical and experimental analysis of different ventilation systems in deep mines *Building and Environment*. Vol. 41/2 pp 87-93.
- [62]. Peters, N. (1988). Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion. *Symposium (International) on Combustion*, vol. 21, no. 1, pp. 1231-1250. ISSN 0082-0784.
- [63]. Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion*. 1st ed. Cambridge: Cambridge University Press. ISBN 0-511-01927-0.
- [64]. Plessing, T., Kortschik, C., Peters, N. Mansour, M.S., Cheng R.K. (2000). Measurements of the Turbulent Burning Velocity and the Structure of Premixed Flames on a Low-Swirl Burner. *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, no. 1, pp. 359-366. ISSN 1540-7489.
- [65]. Ranga Dinesh, K. K. J., Jenkins, K.W., Savill, A.M., Kirkpatrick, M.P. (2012). Swirl Effects on External Intermittency in Turbulent Jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2, vol. 33, no. 1, pp. 193-206. ISSN 0142-727X.
- [66]. Roback, R. and Johnson, B.V. (1983). Mass and Momentum Turbulent Transport Experiments with Confined Swirling Coaxial Jets. NASA Technical Reports NASA-CR-168252.
- [67]. Rotman, D. A. and Oppenheim, A. K. (1988). Aerothermodynamic Properties of Stretched Flames in Enclosure. *Twenty-First Symposium (International on Combustion)*, vol. 21, no. 1, pp. 1303-1312. ISSN 0082-0784.
- [68]. Sadiki, A., Maltsev, A., Wegner, B., Flemming, F., Kempf, A., Janicka J. (2006). Unsteady Methods (URANS and LES) for Simulation of Combustion Systems.

- International Journal of Thermal Sciences, vol. 45, no. 8, pp. 760-773. ISSN 1290-0729.
- [69]. Sandberg, M. (1981). What is the ventilation efficiency? *Building and Environment*, 16 pp.123–35.
- [70]. Schildmacher, K.U., Koch, R. Bauer, H.J. (2006). Experimental Characterization of Premixed Flame Instabilities of a Model Gas Turbine Burner. *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 76, no. 2, pp. 177-197. ISSN 1573-1987.
- [71]. Sequera, D. and Agrawal A. K. (2007). Effect of Fuel Composition on Emissions from a Low-Swirl Burner. *American Society of Mechanical Engineers*, Paper No: GT2007-28044, pp.789-800 ISBN 9780791847916 [0791847918].
- [72]. Sirovich, L., and Rodriguez, J. D. (1987). Coherent Structures and Chaos: A Model Problem. *Physics Letters A*, vol. 120, no. 5, pp. 211-214. ISSN 0375-9601.
- [73]. Spalding, B. (1979). *Combustion and Mass Transfer*. Pergamon, Oxford. ISBN 978-0-08-022106-9.
- [74]. Syred, N. (2006). A Review of Oscillation Mechanisms and the Role of the Precessing Vortex Core (PVC) in Swirl Combustion Systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 32, no. 2, pp. 93-161. ISSN 0360-1285.
- [75]. Szasz, R. Z., Duwig, C. and Fuchs, L. (2008). Noise Generated by a Lifted Flame in a Vitiated Co-Flow. *New York, NY: American Society of Mechanical Engineers. ASME Turbo Expo 2008: Power for Land, Sea, and Air*. Paper No. GT2008-51186 pp. 867-876.
- [76]. Szasz, R. Z., Mihaescu, M. and Fuchs, L. (2006). Computations of the Acoustic Field in an Annular Gas Turbine Combustion Chamber using a Hybrid Approach. *New York, NY: American Society of Mechanical Engineers*, Paper No. GT2006-90024.
- [77]. Therkelsen, P.L, Portillo, J.E., Littlejohn, D., Martin, S.M. and Cheng, R.K. (2013). Self-Induced Unstable Behaviors of CH₄ and H₂/CH₄ Flames in a Model Combustor with a Low-Swirl Injector. *Combustion and Flame*, 2, vol. 160, no. 2, pp. 307-321. ISSN 0010-2180.
- [78]. Tsuji, H. (1982). Counterflow Diffusion Flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 8, no. 2, pp. 93-119. ISSN 0360-1285.
- [79]. Valera-Medina, A., Syred, N. and Griffiths, A. (2009). Visualisation of Isothermal Large Coherent Structures in a Swirl Burner. *Combustion and Flame*, 9, vol. 156, no. 9, pp. 1723-1734. ISSN 0010-2180.

- [80]. Veynante, D. and Vervich, L. (2002). Turbulent Combustion Modeling. Progress in Energy and Combustion Science, 3, vol. 28, no. 3, pp. 193-266. ISSN 0360-1285.
- [81]. Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.W. Combustion. (2006). Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. Fourth edition ed. Springer, ISBN 3-540-25992-9.
- [82]. Williams, F. A. (1985). Combustion Theory. The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems. Second Edition ed. California: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc. ISBN 0-8053-9801-5.

CAPÍTULO 3

ANÁLISIS ISOTERMO RANS

3	ANÁLISIS ISOTERMO RANS	57
3.1	MODELO NUMÉRICO	57
3.1.1	Ecuaciones de conservación	57
3.1.2	Turbulencia.....	57
3.1.3	Métodos numéricos.....	72
3.1.4	Geometría	78
3.1.5	Condiciones operativas.....	81
3.1.6	Mallado.....	83
3.1.7	Condiciones de contorno	85
3.1.8	Casos analizados, hardware y software.....	86
3.2	OPTIMIZACIÓN MODELO NUMÉRICO	88
3.2.1	Parámetros de análisis	88
3.2.2	Análisis de independencia del mallado	92
3.2.3	Modelo de turbulencia	96
3.2.4	Esquema discretización	102
3.2.5	Acoplamiento presión-velocidad.....	103
3.2.6	RESUMEN DE LOS MODELOS NUMÉRICOS ÓPTIMOS	104
3.3	VALIDACIÓN.....	105
3.3.1	Test 1. Palm.....	105
3.3.2	Test 2. Roback-Johnson	108
3.4	CONCLUSIONES	110
3.5	REFERENCIAS	113
4.7	REFERENCIAS	143

3 ANÁLISIS ISOTERMO RANS

3.1 Modelo numérico

Se ha mostrado que el análisis isoterma puede proporcionar importante información acerca de los procesos de mezcla que condicionarán el comportamiento de flujos rotantes en quemadores con alto número de Damköhler.

Se realiza un análisis de dinámica de fluidos computacional (CFD) isoterma a los casos test descritos en 2.4.3 correspondientes a los experimentos de Roback et al. (1983) y Palm et al. (2005).

3.1.1 Ecuaciones de conservación

Las ecuaciones de gobierno del fenómeno físico son las ecuaciones de Navier-Stokes para un flujo transitorio, tridimensional e isoterma.

Ecuación de conservación de la masa (1 ecuación):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad 3-1$$

Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (3 ecuaciones):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{v}) + \nabla (\rho \bar{v} v) = -\nabla P + \nabla \bar{\tau}' + \rho \bar{f}_m \quad 3-2$$

El tensor de esfuerzos viscosos $\bar{\tau}'$ para un fluido newtoniano según la ley Navier-Poisson es:

$$\bar{\tau}' = \mu (\bar{\nabla} v + \bar{\nabla} v^T) + (\mu_T - \frac{2}{3} \mu) \nabla \cdot \bar{v} \bar{I} \quad 3-3$$

3.1.2 Turbulencia

La turbulencia es un fenómeno muy complejo, que desafortunadamente se presenta casi siempre en aplicaciones industriales. Se describe como un movimiento fluctuante y desordenado con las siguientes características:

- Irregularidad. Se caracteriza por la existencia de fluctuaciones con escalas muy diferentes de velocidad, presión, temperatura o concentración.
- Tridimensionalidad.
- Los fenómenos de transporte se ven incrementados (cantidad de movimiento y energía) por lo que existe alta difusividad turbulenta.
- Disipación. Es necesario un aporte continuo de energía para que la turbulencia no decaiga.
- Asociado con altos números de Reynolds.
- Tiene lugar en un amplio rango de escalas espaciales y temporales.

3.1.2.1 Escalas de la turbulencia y espectro de energía

La teoría de Kolmogorov caracteriza las principales escalas turbulentas, describe la transferencia de energía entre los diferentes tamaños así como los principales regímenes de producción. Además suministra el espectro de energía que indica la distribución de energía turbulenta entre el rango de tamaño de los torbellinos. Una descripción detallada del espectro de la energía puede encontrarse en Pope (2010).

La energía turbulenta se genera en la macroescala y se transfiere a las escalas intermedias. Desde éstas, se transfiere hasta la microescala donde se disipa la energía. Se muestra un esquema de la transferencia de energía entre las distintas escalas de la turbulencia en la Figura 3-1.

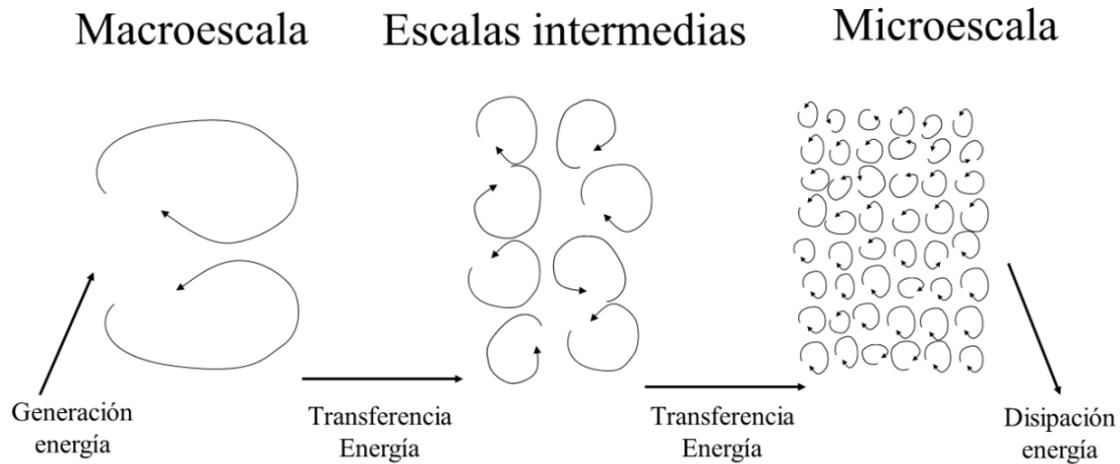


Figura 3-1 Transferencia de energía turbulenta entre las distintas escalas de la turbulencia

Las longitudes, velocidades, tiempos y números de Reynolds característicos asociados a macroescala, escalas intermedias y de la microescala se muestran en la Tabla 3-1 y en Pope (2010).

Tabla 3-1 Características de las escalas de la turbulencia.

	Macroescala	Esc. intermedias	Microescala
Carácter	Anisótropa	-	Isótropa y universal
Longitud característica	l_0	l	η
Velocidad característica	u_0	u	u_η
Tiempo característico	T	τ	τ_η
Reynolds	$Re_L = u_0 l_0 / \nu$	$Re_l = u l / \nu$	$Re_\eta = u_\eta \eta / \nu$

Para comprender la transferencia de energía entre las distintas escalas de la turbulencia y la energía contenida en cada una de ellas se suele trabajar con el espectro de energía del flujo en el que se define $E(\kappa)$ como la energía contenida en torbellinos de tamaño l siendo κ el número onda, que se define como la frecuencia de la escala del torbellino.

$$E(\kappa) = C \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3} f_L f_\eta \tag{3-4}$$

$$\kappa=2\pi/l \tag{3-5}$$

Los términos $\epsilon^{2/3}$ y $\kappa^{-5/3}$ se obtienen por análisis dimensional mientras que f_L y f_η se obtienen por correlaciones experimentales. f_L es función de la macroescala (que tiende a 1 para valores de la macroescala L) y f_η es función de la microescala (que tiende a 1 para valores de la microescala η):

$$f_L = \left(\frac{\kappa \cdot l_0}{\left[(\kappa \cdot l_0)^2 + c_L \right]^{1/2}} \right)^{p_0+5/3} \tag{3-6}$$

$$f_\eta = e^{-\beta \left[(\kappa \eta)^4 + c_\eta^4 \right]^{1/4} - c_\eta} \tag{3-7}$$

La energía cinética turbulenta es la integral $E(\kappa)$ para todas las frecuencias espaciales.

$$k = \int_0^\infty E(\kappa) d\kappa \tag{3-8}$$

Las constantes son determinadas experimentalmente para que la integración del espectro de energía $E(\kappa)$ sea k siendo los valores los indicados en 3-9.

$$c_L \approx 6.78 \quad c_\eta \approx 0.4 \quad C = 1.5 \quad p_0 = 2 \quad \beta = 5.2 \tag{3-9}$$

Si se representa el espectro de la energía en función del número de onda se pueden apreciar tres zonas; las grandes escalas, la escala inercial y la microescala según se indica en Pope (2010) (Figura 3-2).

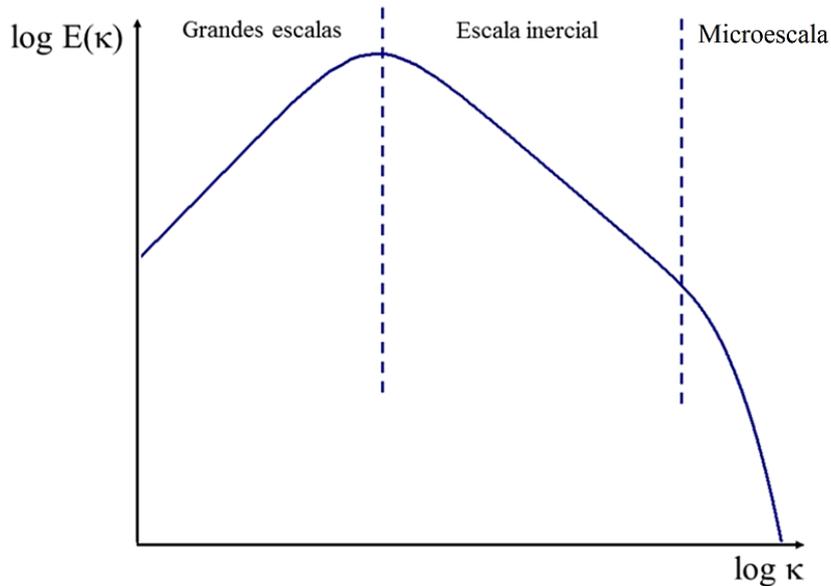


Figura 3-2 Espectro de la energía en función del número de onda

3.1.2.2 Técnicas de tratamiento de la turbulencia

La turbulencia es un fenómeno complejo, gobernado por las ecuaciones de Navier Stokes. No existe una teoría completa del fenómeno, por lo que en la actualidad se opta por técnicas distintas en función de las escalas temporales y espaciales modeladas (Figura 3-3). Las principales características de cada uno de ellos se resumen en la Tabla 3-2.

Los modelos empleados para la resolución de la turbulencia en orden decreciente respecto a requerimientos de malla y coste computacional según Menter (2015) y Menter et al. (2010) son:

- DNS (Direct Numerical Simulation)
- SRS (Scale-Resolving Simulation)
 - o LES (Large Eddy Simulations)
 - o DES (Detached Eddy Simulations)
 - o SAS (Scale Adaptive Simulation)
- RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)

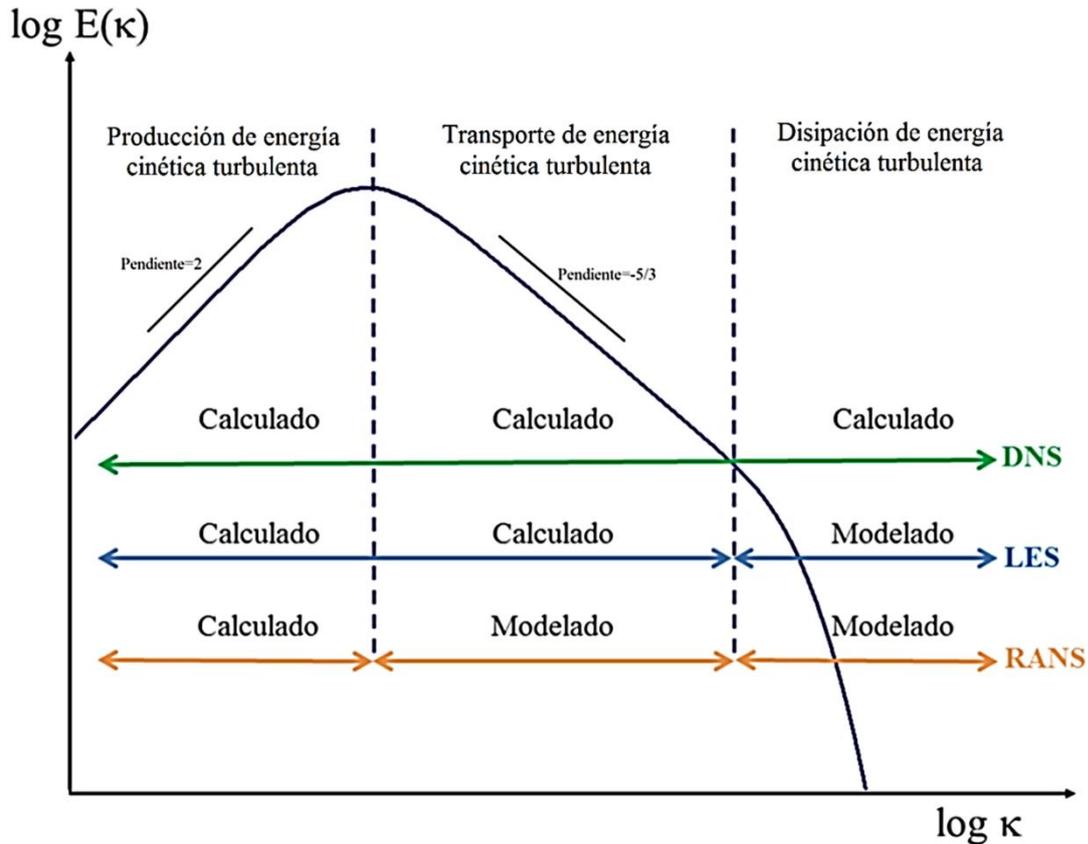
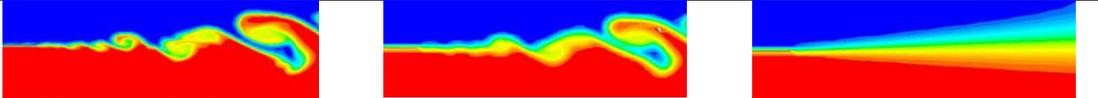


Figura 3-3 Técnicas de tratamiento de la turbulencia en función de las escalas características de los torbellinos.

Tabla 3-2 Características de las técnicas de tratamiento de la turbulencia (Eggensteiner, 2012)

DNS (Direct Numerical Simulation)	SRS (Scale Resolving Simulations)	RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes Simulations)
Se resuelven completamente las ecuaciones de Navier Stokes.	El movimiento de los grandes torbellinos se resuelve directamente mientras que los más pequeños filtrados por el mado se modelan. Incluye modelos LES (Large Eddy Simulations).	Se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes de forma promediada en el tiempo. Los modelos RANS son el único enfoque de modelado en estado estacionario de los flujos turbulentos.
Transitorio	Inherentemente transitorio	Estacionario/transitorio
No se requiere el modelado	Se modelan las escalas más pequeñas	Todas las escalas de turbulencia son modeladas.
Herramienta de investigación lejos de ser usada en el ámbito industrial	Se está comenzando a usar en la industria.	Este es el método más utilizado para flujos industriales.



3.1.2.3 Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)

Debido a que en las aplicaciones industriales se suele estar más interesado en el flujo medio que en los detalles de las fluctuaciones, se trata la turbulencia mediante métodos estadísticos.

Por lo tanto, se realiza un promediado temporal de las ecuaciones de Navier-Stokes. Así se puede resolver el comportamiento general del flujo sin necesidad de calcular las escalas más pequeñas. El resultado obtenido son las ecuaciones RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Cada variable de las ecuaciones RANS se divide en dos componentes que representan el valor medio \bar{A} y la fluctuación aleatoria A' en el tiempo y en el espacio.

$$A = \bar{A} + A' \quad 3-10$$

El valor medio en el tiempo de la fluctuación es nulo. Las ecuaciones RANS en forma conservativa quedan de la siguiente manera:

Conservación de la masa RANS incompresible (1 ecuación):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0 \quad 3-11$$

Conservación de la cantidad de movimiento RANS incompresible (3 ecuaciones):

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) + \nabla \bar{p} = \mu \Delta \vec{v} + \rho \vec{f}_m + \nabla(-\overline{\rho \vec{v}' \vec{v}'}) \quad 3-12$$

El último término es un promediado temporal del producto de dos fluctuaciones. Si las fluctuaciones fuesen aleatorias o no estuvieran correlacionadas sería nulo, pero éste no es el caso de la turbulencia, por lo que en general es distinto de cero. Las nuevas incógnitas se conocen como tensiones de Reynolds, y es un tensor simétrico cuyos elementos tienen dimensiones de esfuerzos.

El tensor de esfuerzos de Reynolds se muestra en la ecuación 3-13.

$$-\overline{\rho \vec{v}' \vec{v}'} = \begin{bmatrix} -\overline{\rho v'_x{}^2} & -\overline{\rho v'_x v'_y} & -\overline{\rho v'_x v'_z} \\ -\overline{\rho v'_x v'_y} & -\overline{\rho v'_y{}^2} & -\overline{\rho v'_y v'_z} \\ -\overline{\rho v'_x v'_z} & -\overline{\rho v'_y v'_z} & -\overline{\rho v'_z{}^2} \end{bmatrix} \quad 3-13$$

Debido a que se añaden seis nuevas incógnitas pero se mantiene el mismo número de ecuaciones, es necesario relacionarlas con las incógnitas anteriores. Esta relación se conoce como cierre de las ecuaciones o modelo de turbulencia.

Para ello se tienen dos opciones:

- a) Relacionar las nuevas incógnitas directamente con los gradientes de velocidades medias mediante ecuaciones adicionales a través del concepto de viscosidad de torbellino introducido por Boussinesq en 1877. La principal hipótesis es que se considera isótropo el tensor de esfuerzos de Reynolds. Este procedimiento se utiliza en los modelos de viscosidad de torbellino o Eddy Viscosity Models (EVM).
- b) Plantear ecuaciones para las nuevas incógnitas. Estas ecuaciones a su vez introducen nuevas incógnitas que hay que relacionar con magnitudes conocidas. Esta metodología es la que siguen los modelos de tensiones de Reynolds (RSM).

3.1.2.3.1 Modelos de viscosidad de torbellino (EVM)

Si se emplea la aproximación de Boussinesq y se expresa en notación de subíndices, el tensor de esfuerzos de Reynolds se obtiene la ecuación 3-13. S_{ij} es el tensor de velocidades de deformación medias, k la energía cinética turbulenta, δ_{ij} la delta de Kronecker y μ_T la viscosidad turbulenta que se relacionará en cada modelo de turbulencia con el producto de una longitud de escala turbulenta (L) y una escala de velocidad turbulenta. Se emplean modelos de ecuaciones de transporte para expresar la viscosidad turbulenta en términos de la escala velocidad y longitud de la turbulencia.

$$-\overline{v_i' v_j'} = 2\mu_T S_{ij} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad 3-14$$

$$k = \frac{1}{2} \overline{v_i' v_i'} \quad 3-15$$

$$S_{ij} = \left(\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{v_j}}{\partial x_i} \right) \quad 3-16$$

La hipótesis de Boussinesq se utiliza en los modelos de turbulencia Spalart-Allmaras, $k-\epsilon$, $k-\omega$, Transition $K-k-l-w$, Transition SST y $v2f$. La principal diferencia

entre los modelos anteriores consiste en el número de ecuaciones de transporte resueltas.

Se describen las principales características y ecuaciones de los modelos que se emplearán posteriormente para el análisis isotermodel quemador:

- El modelo Spalart-Allmaras resuelve una ecuación de transporte para la viscosidad turbulenta.
- Los modelos clásicos k-ε y k-ω emplean una ecuación de transporte para la energía cinética de turbulenta y otra para la tasa de disipación de la turbulencia.
- El modelo k-kl-ω transition emplea tres ecuaciones de conservación (energía cinética turbulenta k_T , energía cinética laminar k_L y para la disipación, ω).
- El modelo transition SST se basa en el acoplamiento del k-ω con dos ecuaciones adicionales, una para la intermitencia y otra para el criterio de inicio de la transición.
- Por último los modelos v2f son similares a k-ε y a k-ω con la salvedad de que incluyen dos ecuaciones adicionales, una para la varianza de la velocidad y otra para una función de relajación elíptica.

Se describen en detalle las ecuaciones y características de los principales modelos de turbulencia:

- Modelos de 0 ecuaciones

Entre los modelos algebraicos o de 0 ecuaciones se encuentran el de longitud de mezcla, el modelo de Cebeci-Smith y modelo de Baldwin-Lomax.

Se describirá solo el modelo de longitud de mezcla. Éste se fundamenta en la distancia que desplaza un torbellino turbulento a una partícula fluida (l_{mix}). Solo sirve para flujo externo y la longitud de mezcla se toma de modelos experimentales. La viscosidad se estima según la ecuación 3-17:

$$v_T = l_{mix}^2 \left| \frac{dU}{dy} \right| \quad 3-17$$

- Modelos de 1 ecuacion

o Modelo de Spalart-Allmaras

El Spalart-Allmaras es un modelo de una sola ecuación (transporte de viscosidad de remolino cinemática). Fue diseñado específicamente para aplicaciones aeroespaciales con flujos cercanos a la pared. Genera buenos resultados para capa límite con gradientes de presión adversos. También se suele usar en las aplicaciones de turbomaquinaria. Es computacionalmente económico para mallas grandes y adecuado para complejidad media como flujos bidimensionales, flujo externo e interno con capas límites con bajo gradiente de presión como perfiles aerodinámicos, alas, fuselaje de aviones o misiles. No es adecuado para flujos tridimensionales o con capa de cortadora o flujos con fuerte separación. La ecuación de transporte en el modelo Spalart-

Allmaras, se aplica a $\bar{\nu}$ que coincide con la viscosidad cinemática turbulenta excepto en las zonas cerca de la pared.

La ecuación de transporte de la viscosidad turbulenta modificada según Spalart (1994) es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{\nu}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\bar{\nu}u_i) = \frac{1}{\sigma_\nu} \left[\frac{\partial}{\partial x_j}(\mu + \rho\bar{\nu}) \frac{\partial \bar{\nu}}{\partial x_j} + C_{b2}\rho \left(\frac{\partial \bar{\nu}}{\partial x_j} \right)^2 \right] - Y_\nu + S_\nu + G_\nu \quad 3-18$$

donde G_ν es la producción de la viscosidad turbulenta, Y_ν es la destrucción de la viscosidad turbulenta S_ν es un término fuente.

Los modelos de una ecuación basados en la viscosidad turbulenta son completos. Este es el caso de los modelos de Baldwin-Barth y Spalart-Allmaras.

Estos modelos evitan especificar la escala de disipación expresando la disipación de la viscosidad turbulenta en términos de gradientes espaciales.

La mayoría de los modelos DES (Detached Eddy Simulation) están basados en el modelo de Spalart-Allmaras cerca de la pared.

- Modelos de 2-ecuaciones
 - o Modelo k- ϵ

El modelo k- ϵ es el modelo más común en aplicaciones industriales. Suele ser usado en CFD y flujo turbulento para obtener las características del flujo medio. Proporciona una descripción general de la turbulencia mediante la resolución de dos ecuaciones de transporte.

A diferencia de los modelos de turbulencia anteriores, el modelo k- ϵ se fundamenta en los mecanismos relacionados con la energía cinética turbulenta.

Los modelos de turbulencia de dos ecuaciones se basan en la obtención de una longitud turbulenta y una escala de tiempo mediante la solución de dos ecuaciones de transporte.

Existen tres variantes:

- Standard:

Este modelo se propuso en Launder et al. (1972). Desde su desarrollo ha sido, uno de los más empleados en ingeniería gracias a su robustez, exactitud razonable para una amplia gama de flujos turbulentos. Además el coste computacional es razonable por lo que es uno de los más empleados en simulaciones de flujo y transferencia de calor en aplicaciones industriales. Se trata de un modelo semi-empírico. La obtención de las ecuaciones del modelo se basa en algunas consideraciones experimentales.

Es un modelo robusto y ampliamente utilizado a pesar de las limitaciones conocidas del modelo. Proporciona una aproximación poco detallada para flujos complejos que implican la separación y curvatura. Es adecuado para iteraciones iniciales, selección inicial de diseños alternativos y estudios paramétricos.

Las ecuaciones de conservación del modelo k-ε standard (Launder, 1972) se muestran en 3-19 y 3-20.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \left(\frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad 3-19$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad 3-20$$

La viscosidad turbulenta se relaciona con la energía cinética turbulenta y la disipación de ésta según la ecuación 3-21.

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad 3-21$$

Con el objeto de aprovechar las fortalezas y mejorar las debilidades, se han realizado modificaciones sobre este modelo. Las más importantes son el modelo k-ε RNG y el modelo k-ε Realizable.

- k-ε RNG

Es un modelo conveniente para flujos con capa de cortadura compleja, rotación moderada, vórtices y flujos locales de transición (por ejemplo, separación de capa límite, desprendimiento de vórtices detrás cuerpos, difusores, ventilación).

Es similar en forma al k-ε standard, pero tiene un término adicional en su ecuación que mejora la precisión de los flujos rápidamente variados, flujos rotantes y de bajo números de Reynolds. Las ecuaciones de conservación se muestran en 3-22 y 3-23 (Orszag, 1993).

De forma general el modelo k-ε RNG es más preciso y fiable para más tipos de flujos que el k-ε standard. Una descripción más completa y su aplicación a la turbulencia se pueden encontrar en Yakhot et al. (1986).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\alpha_k \mu_{eff} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad 3-22$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \quad 3-23$$

Para altos Reynolds la viscosidad turbulenta se calcula de forma análoga al modelo k-ε standard (con distinto coeficientes), pero existen modificaciones para bajos Reynolds.

La turbulencia, en general, se ve afectada por la rotación. El modelo k-ε RNG en proporciona una opción para tener en cuenta los efectos del swirl o rotación (RNG

Swirl Modification) (ecuación 3-24) mediante la modificación de la viscosidad turbulenta de manera apropiada. Será un modelo candidato a proporcionar resultados aceptables en el caso que se pretende simular. La modificación tiene la siguiente forma funcional descrita en 3-24.

$$\mu_T = \mu_{T0} f\left(\alpha_s, \Omega, \frac{k}{\varepsilon}\right) \quad 3-24$$

μ_{T0} es el valor de la viscosidad turbulenta calculada sin la modificación por swirl que se realiza en el modelo k- ε RNG, Ω es un número de turbulencia característica evaluada internamente mientras que α_s es una constante de swirl o rotación que asume valores diferentes en función de si el flujo es dominado por la rotación o solo ligeramente afectado por ésta. Por defecto, se considera este valor como 0.07. Para flujos con una intensidad de rotación mayor se puede modificar.

- Realizable:

Dispone en gran parte de los mismos beneficios y tiene aplicaciones similares al k- ε RNG. Es un modelo más preciso y más fácil para converger que el anterior. El modelo k- ε realizable contiene una nueva formulación para la viscosidad turbulenta y una nueva ecuación de transporte para la tasa de disipación, ε . Las ecuaciones de conservación se muestran en 3-25 y 3-26 (Shih, 1995)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad 3-25$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \right] + \rho C_1 S \varepsilon \\ & - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b - C_{1\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_{b\varepsilon} + S_\varepsilon \end{aligned} \quad 3-26$$

- Modelo k- ω

- Standard k- ω :

Está basado en el modelo k- ω de Wilcox que incorpora modificaciones para bajos números de Reynolds (Wilcox, 1998). Tiene problemas para flujos con capa libre de cortadura, aunque proporciona un rendimiento superior para capa límite, capa de cortadura libre, y bajo número de Reynolds. Es un modelo adecuado para capa límite con bajo gradiente de presión adverso y la separación (aerodinámica externa y turbomaquinaria). Puede ser utilizado para los flujos de transición aunque puede predecir transición temprana.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\Gamma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - Y_k + S_k \quad 3-27$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_k \left(\frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) \right] + G_\omega - Y_\omega + S_\omega \quad 3-28$$

- SST k- ω :

Tiene beneficios similares al Standard k- ω , pero con la modificación de que estima mejor flujos con capa libre de cortadura y una amplia variedad de flujos con gradientes de presión adversos u ondas de choque transónicas. Se emplea una viscosidad turbulenta limitada. Las ecuaciones de transporte son las mismas y solo cambia la estimación de la viscosidad turbulenta.

- Modelos de 3 ecuaciones

- o k-kl-w Transición.

El modelo k-kl-w de transición se utiliza para predecir el desarrollo de la capa límite y calcular la transición. Este modelo se puede utilizar para tratar eficazmente la transición de capa límite laminar a turbulenta. Las ecuaciones de transporte que se resuelven son las relativas a la energía cinética turbulenta (k_t) la energía cinética laminar (k_l) y el inverso de la escala de tiempos turbulenta (ω) (Walters, 2008).

$$\frac{Dk_T}{Dt} = P_{k_T} + R + R_{NAT} - \omega k_T - D_{T+} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\alpha_T}{\alpha_k} \Gamma_k \right) \frac{\partial k_T}{\partial x_j} \right] \quad 3-29$$

$$\frac{Dk_L}{Dt} = P_{k_L} - R + R_{NAT} - D_L + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \frac{\partial k_L}{\partial x_j} \right] \quad 3-30$$

$$\begin{aligned} \frac{D\omega}{Dt} = C_{\omega 1} \frac{\omega}{k_T} P_{k_T} + \left(\frac{C_{\omega R}}{f_\omega} - 1 \right) \frac{\omega}{k_T} (R + R_{NAT}) - C_{\omega 2} \omega^2 + \\ C_{\omega 3} f_\omega \alpha_T f_w^2 \frac{k_T}{d^3} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\alpha_T}{\alpha_k} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \end{aligned} \quad 3-31$$

- o Transition SST Model

El modelo de SST de transición se basa en el acoplamiento de las ecuaciones de transporte SST con otras dos ecuaciones de transporte, uno para la intermitencia y uno para los criterios de inicio de transición. La intermitencia es el porcentaje del tiempo del flujo turbulento frente al tiempo total. Además, dispone de una opción para introducir una correlación empírica definida por el usuario, para controlar la transición. (Menter, 2004).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\gamma) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \gamma) = P_{\gamma 1} - E_{\gamma 1} + P_{\gamma 2} - E_{\gamma 2} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\gamma} \right) \frac{\partial \gamma}{\partial x_j} \right] \quad 3-32$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\mathbf{Re}}_\theta) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \tilde{\mathbf{Re}}_\theta) = P_{\theta 1} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sigma_\theta (\mu + \mu_T) \frac{\partial \tilde{\mathbf{Re}}_\theta}{\partial x_j} \right] \quad 3-33$$

- Modelos de 4-ecuaciones

- o v2f

La principal dificultad de los modelos de 2 ecuaciones consiste en la especificación de las condiciones más apropiadas cerca de las paredes.

Los modelos de 4 ecuaciones mejoran considerablemente los resultados cerca de la pared, especialmente en separación de flujos, manteniendo prácticamente el mismo coste que los modelos de 2 ecuaciones.

El modelo v2f es similar al modelo k-ε standard, pero incorpora cerca de la pared turbulencia anisótropa y los efectos no locales. Una limitación del modelo es que no se puede utilizar para resolver problemas de múltiples fases de Euler. No necesita hacer uso de las funciones de pared.

La característica distintiva del modelo es el uso de la escala de la velocidad, en lugar de la energía cinética turbulenta, para evaluar la viscosidad de remolino.

El modelo v2f tiene cuatro ecuaciones de transporte, una para la energía cinética turbulenta k, otra para la disipación de ésta ε, otra para la escala de la varianza de la velocidad y una para una función de relajación elíptica f (Durbin, 1995) (Parneix, 1998)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = P - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_k \quad 3-34$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{C_{\varepsilon 1} P - C_{\varepsilon 2} P \rho \varepsilon}{T} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + S_\varepsilon \quad 3-35$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{v^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \overline{v^2} u_i) = \rho k f - 6 \rho \overline{v^2} \frac{\varepsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \overline{v^2}}{\partial x_j} \right] + S_{\overline{v^2}} \quad 3-36$$

$$f - L^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2} = (C_1 - 1) \frac{2}{3} \frac{\overline{v^2}}{k} + C_2 \frac{P}{\rho k} + \frac{5 \overline{v^2} / k}{T} + S_f \quad 3-37$$

3.1.2.3.2 Modelos de tensiones de Reynolds

En flujos con cambios bruscos de curvatura o esfuerzo cortante, corrientes secundarias, 3D o con separación de capa límite la hipótesis de Boussinesq puede fallar.

Se puede emplear otra opción para cerrar las ecuaciones de Reynolds. Ésta consiste en plantear de nuevas ecuaciones de diferenciales de transporte para cada componente del tensor de tensiones de Reynolds y modelar los términos desconocidos.

Los modelos de tensiones de Reynolds resuelven 7 ecuaciones, una por cada tensión de Reynolds y otra para ϵ . Estos modelos en términos físicos son mejores que los modelos RANS, puesto que evitan la hipótesis de viscosidades de torbellino isotrópicas pero por el contrario, requieren más CPU y memoria. Es más complejo de converger por el acoplamiento de las ecuaciones, pero es adecuado para flujos tridimensionales con alta rotación.

Aunque este modelo tiene potencial para representar correctamente los flujos turbulentos, hasta la fecha su éxito ha sido moderado.

Surgen nuevos modelos, pero aún no está claro qué modelo es más adecuado para cada tipo de flujo, existen muchas incertidumbres sobre los errores numéricos como para alcanzar conclusiones significativas.

Sin embargo, el uso de estos modelos es importante cuando las características de flujo de interés turbulencia anisótropa (Ferziger et al. 2002). Entre los ejemplos que pueden ser aptos para este modelo, se puede hablar de flujos en ciclones o cámaras de combustión.

Las ecuaciones de transporte del tensor de tensiones de Reynolds se pueden escribir de la siguiente forma (Gibson, 1978, Launder, 1989 y Launder, 1975) (ecuación 3-38).

El término convectivo (C_{ij}), el término de difusión molecular (D_{Lij}), el término de producción de tensiones (P_{ij}), el término de producción de rotación por el sistema (F_{ij}), son exactos, pero los términos de difusión molecular ($D_{t,ij}$) de producción de flotabilidad (G_{ij}) y los términos Φ_{ij} , y ϵ_{ij} necesitan ser modelados para cerrar las ecuaciones.

Los modelos disponibles en Fluent se diferencian en el modelado del término φ_{ij} :

- Linear Pressure-Strain Model: El modelo por defecto. El más sencillo.
- Quadratic Pressure-Strain Model: Consiste en una mejora del anterior que aproxima mejor flujos rotantes, axilsimétrico y con alta curvatura.
- Low-Re Stress-Omega Model: Modificación que se basa en teoría similar a k-omega y es útil para superficies curvas y flujos rotantes.

$$\begin{aligned}
 & \overbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{u'_i u'_j})}^{t.trans.} + \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u'_k \overline{u'_i u'_j})}^{C_{ij}} = - \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}[\rho \overline{u'_i u'_j u'_k} + P'(\delta_{kj} \overline{u'_i} + \delta_{ik} \overline{u'_j})]}^{D_{T,ij}} \\
 & + \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right]}^{D_{L,ij}} - \overbrace{\rho \left(\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)}^{P_{ij}} + \overbrace{\rho \beta (g_i \overline{u'_j} \overline{\theta} + g_j \overline{u'_i} \overline{\theta})}^{G_{ij}} \quad 3-38 \\
 & + P' \overbrace{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}^{\Phi_{ij}} - 2\mu \overbrace{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}^{\varepsilon_{ij}} - \overbrace{2\rho (\overline{u'_j u'_m} \varepsilon_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} \varepsilon_{jkm})}^{F_{ij}} + \overbrace{\tilde{S}}^{t.fuente}
 \end{aligned}$$

3.1.2.3.3 Resumen modelos RANS

Se muestran en la Tabla 3-3 los modelos de turbulencia más habituales con las características más importantes.

Una de las secciones más importantes del presente trabajo es el estudio de los modelos de turbulencia que mejor predicen el flujo dentro del quemador. Por lo tanto se estudiará de forma detallada cuáles son los modelos que mejor se acercan a la realidad en apartado 3.2.3.

Tabla 3-3 Modelos de turbulencia más comunes

Cierre	Modelo	Variante	Ec.	Características
EVM	Spalart-Allmaras	-	1	Aplicaciones aeroespaciales con flujos compresibles a altas velocidades.
	k-ε	Standard	2	Robusto. Uso general.
		RNG	2	Flujos rápidamente deformados y turbulentos. Chorros planos y cilíndricos, capas límite bajo
		Realizable	2	fuertes incrementos de presión adversos, flujos con separación y recirculación.
	k-ω	Standard	2	Bajos números de Reynolds, contornos de pared, capa límite y flujos no estacionarios.
		SST	2	Incrementos de presión adversos en perfiles aerodinámicos y ondas de choque transitorio.
	Transition K-kl-w	-	3	Para estudiar la transición de flujo laminar a turbulento.
	Transition SST	-	4	Mejora desprendimiento del flujo. Avanzado para transferencia calor.
	V2F	-	4	Similar a k-ε pero incorpora anisotropía cerca de la pared.
				Predice mejor la separación de flujos.
RSM	Tensiones de Reynolds	Linear P.	7	Flujos tridimensionales complejos con elevada turbulencia y rotación. Requiere elevada potencia de cálculo y capacidad de memoria.
		Quadratic P.	7	
		Omega strain	7	

3.1.2.4 SRS (Scale-Resolving Simulation)

Los modelos SRS resuelven grandes torbellinos, mientras que los más pequeños son filtrados. La diferencia de filtrado y las técnicas de resolución permiten diferenciar entre modelos LES (Large Eddy Simulations), SAS (Scale Adaptive Simulation) y DES Detached eddy Simulations (Fröhlich, et al. 2015).

- LES (Large Eddy Simulations)

El modelo LES se basa en la hipótesis de universalidad de las pequeñas escalas de turbulencia. Por lo tanto, la idea es resolver únicamente las grandes escalas de la turbulencia y aproximar el efecto de las pequeñas escalas (por esto el modelo LES necesita una discretización menos fina que el DNS).

Mediante este método y tras un proceso de filtrado espacial de las ecuaciones, se reformula el problema para las velocidades instantáneas (media + fluctuante) que pueden ser capturadas por la malla y se modela el efecto de la disipación para las escalas menores, que no se pueden resolver correctamente con la malla utilizada. A escalas menores, es de esperar que los movimientos turbulentos sean menos dependientes del problema y se puedan modelar de forma más general según Davidson (1997). En el capítulo 5 se realizará un análisis LES.

Pueden dividirse el método LES en cuatro fases:

- 1) Obtener las nuevas variables filtradas de velocidad y presión promediadas en función de las antiguas. Habitualmente se emplea un filtro que elimine las oscilaciones de alta frecuencia, es decir una especie de filtro paso-bajo.
- 2) Obtener las nuevas ecuaciones de movimiento modificadas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes.
- 3) Resolver el clásico problema del cierre de las ecuaciones. Las ecuaciones modificadas no dependen solo de las nuevas variables. Hay que transformar las ecuaciones en otras que dependan únicamente de las nuevas variables filtradas.
- 4) Resolver la nueva ecuación con métodos numéricos similares a los empleados en CFD.

- Detached eddy simulation (DES)

Esta nueva técnica trata de aprovechar los puntos fuertes de los modelos RANS y LES, ya que los modelos LES no son eficientes cerca de la pared donde la turbulencia no es isotrópica, pero se comportan muy bien en las regiones alejadas de ella.

En resumen, RANS será utilizado en la parte más externa de la capa límite, en la zona próxima a la pared y LES en las regiones alejadas, siendo necesaria una función de Van Driest para cancelar LES en las proximidades de la pared.

- SAS (Scale Adaptive Simulation)

Los modelos LES y DES son poco viables cuando las mallas son finas y los pasos de tiempo son pequeños para resolver escalas de turbulencia pequeñas. Surge la posibilidad de plantear un nuevo modelo híbrido, que es capaz de resolver estructuras con grandes escalas de turbulencia sin las restricciones de tamaño de paso de tiempo y resolución de malla de los modelos LES.

Proporciona contenido LES en regiones transitorias e información sobre el espectro turbulento. Se basan en el uso de una nueva escala de longitud (von Karman scale) que localiza efectos no estacionarios.

3.1.2.5 Direct numerical simulation (DNS)

No se trata de un modelo de turbulencia, sino de la solución completa de las ecuaciones de Navier-Stokes. Todas las escalas espaciales y temporales del flujo turbulento son resueltas sin realizar promediados ni aproximaciones. Los errores provienen únicamente de las discretización. La idea es muy sencilla pero también compleja, debido al alto coste computacional.

Este método resultaría inabordable en problemas con altos números de Reynolds, ya que sería preciso resolver todas las escalas del movimiento (desde la dimensión característica del problema hasta la escala de Kolmogorov o microescala), donde se disipa la energía.

Algunos autores como Versteeg et al. (1995) estiman que el número de elementos o celdas es del orden de $Re^{9/4}$

Para el quemador que se pretende simular, se tiene un número de Reynolds de aproximadamente 6620. Sería necesario emplear 400 millones de celdas aproximadamente por lo que en el caso que se pretende simular esta técnica es inviable. La utilización queda limitada a geometrías con condiciones de contorno sencillas y números de Reynolds bajos.

3.1.3 Métodos numéricos

Las ecuaciones de Navier Stokes se pueden resolver mediante los siguientes métodos.

3.1.3.1 Métodos de diferencias finitas: FDM

Se fundamentan en la formulación diferencial de las ecuaciones. Las derivadas parciales se reemplazan por combinaciones lineales de valores de la función en los nodos. No se garantiza la conservación pero a cambio se trata de un método sencillo, efectivo. Además, es posible alcanzar un alto orden. Solo se puede aplicar a mallas estructuradas. Si se resuelven problemas tridimensionales la malla ha de estar estructurada en las 3 direcciones lo que eleva notablemente la complejidad. Las mallas curvas se han de transformar a cartesianas.

3.1.3.2 Métodos de elementos finitos: FEM

El dominio se divide en elementos. En cada uno de ellos, la solución se aproxima habitualmente de forma polinómica utilizando los valores de la función en los vértices. Son apropiados para geometrías complejas. Utilizan la formulación débil y son complejos de programas debido al alto rigor matemático. Las geometrías complejas y las mallas no estructuradas se pueden tratar de manera más sencilla.

3.1.3.3 Métodos espectrales

En los métodos espectrales se buscan o ensayan soluciones aproximadas a un sistema de ecuaciones diferenciales. Habitualmente se suele usar la transformada de Fourier. Se escribe la solución de la ecuación diferencial como combinación de series típicas. La forma en que se determinan los coeficientes de dichas series da lugar a los diferentes métodos espectrales.

Una de las ventajas es su mayor grado de precisión en sus soluciones que las logradas con otros métodos, además de que el número de puntos de empleados es significativamente más reducido.

3.1.3.4 Método de los volúmenes finitos (FVM)

El Método de Volúmenes Finitos aprovecha la naturaleza conservativa de las ecuaciones de Navier-Stokes. Este método es el más utilizado en Mecánica de Fluidos Computacional.

Se discretiza el dominio computacional en pequeños volúmenes o celdas. Se aplican balances de masa y cantidad de movimiento en estas celdas. Los valores escalares de la solución se almacenan en el centroide de cada celda. Las velocidades se guardan en las caras de las celdas.

3.1.3.5 Códigos numéricos

Los primeros códigos de resolución CFD comerciales tuvieron lugar en los años 80. La Tabla 3-4 muestra los principales códigos comerciales y libres, diferenciados por técnica de resolución.

Tabla 3-4 Códigos de dinámica de fluidos computacional

Método numérico	Comercial	Libre
FVM	ANSYS FLUENT	OpenFOAM
	STAR-CCM+	FREECFD
	PHOENICS	NaSt3DGP
	NaSt3DGPF	CLAWPACK
	COSMOS	
	FloWorks	
FEM	CFX	
	ANSYS POLYFLOW	FEniCS
	FIDAP	ELMER
FDM	Flow 3D	

3.1.3.6 Estrategias de resolución

El Método de Volúmenes Finitos ofrece dos técnicas de resolución: *Density-Based Coupled Solver* (DBCS) y *Pressure-Based Solver* (PBS). El enfoque basado en la presión fue desarrollado para flujos incompresibles de baja velocidad, mientras que el enfoque basado en la densidad, se utiliza principalmente para flujo compresible de alta velocidad. Sin embargo, recientemente ambos métodos se han mejorado para resolver y operar para una amplia gama de condiciones de flujo más allá de su intención tradicional u original.

El método DBCS (Figura 3-4) resuelve, simultáneamente, las ecuaciones de conservación de la masa, de cantidad de movimiento, de la energía y de conservación de las especies. Se utiliza cuando las variables son muy interdependientes entre sí, como por ejemplo flujo compresible, combustión basada en un mecanismo de reacción, ondas de choque o flujos supersónicos.

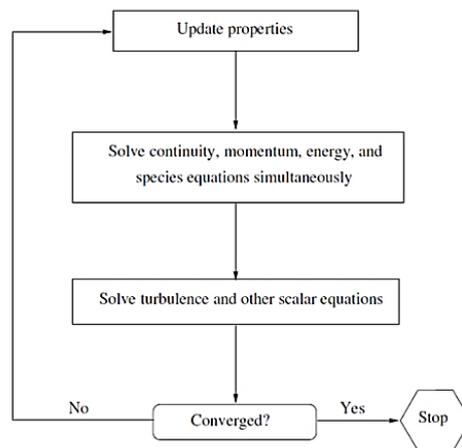


Figura 3-4 Metodología de resolución de las ecuaciones con un *solver* DBCS (ANSYS 2012a):

El método PBS (Figura 3-5) toma como variables principales la cantidad de movimiento y la presión puesto que se aplica a flujos incompresibles.

Es un procedimiento más flexible, que permite elegir resolver las ecuaciones de forma acoplada para problemas elípticos o segregada para problemas parabólicos.

La primera parte de esta línea de investigación se centrará en el método PBS, debido a que se simulará solo el flujo sin combustión puesto que los resultados apenas variarán debido a que como se ha comentado, el quemador de flujo rotante, está gobernado completamente por la turbulencia del flujo.

En ambos métodos se obtiene el campo de velocidad de las ecuaciones de momento. En el enfoque basado en la densidad, la ecuación de continuidad se utiliza para obtener el campo de densidad, mientras que el campo de presión se determina a partir de la ecuación de estado.

Por otro lado, en el enfoque basado en la presión, el campo de presión se extrae mediante la resolución de una ecuación de corrección de la presión.

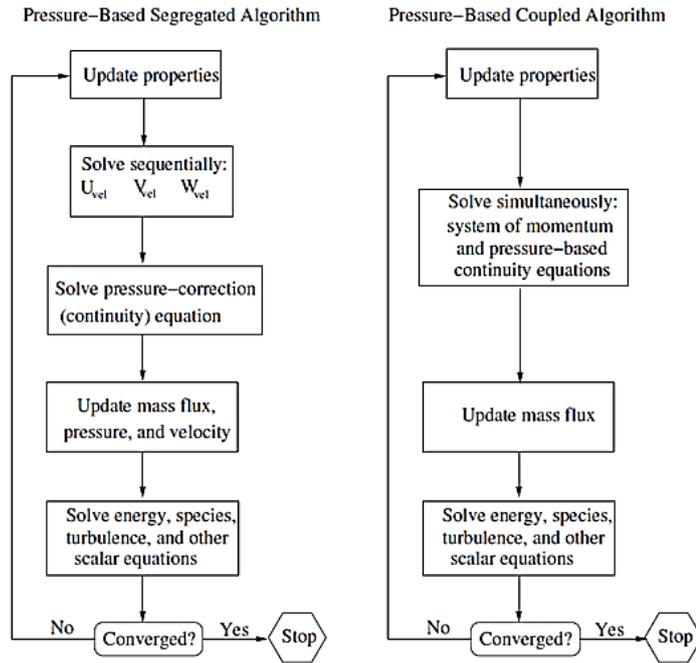


Figura 3-5 Metodología de resolución de las ecuaciones con un solver PBS (ANSYS 2012a):

3.1.3.7 Acoplamiento presión-velocidad

El método de resolución que se va a utilizar (PBS), toma como variables principales los campos de presión y de velocidades que en general no son conocidos, y forman parte de la solución del problema. Las tres componentes de la velocidad aparecen como incógnitas no lineales en el término convectivo de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento, siendo una de las principales razones por las cuales las ecuaciones de Navier-Stokes no se pueden integrar de forma explícita y la presión sólo aparece en esta ecuación cuando el fluido es incompresible (con flujo compresible también aparece en la ecuación de estado).

Para resolver el problema de la no linealidad y la relación entre la presión y la velocidad, se emplean los denominados algoritmos de acoplamiento presión-velocidad. Los métodos iterativos SIMPLE parten de una estimación del campo de presiones y calculan el campo de velocidades a través de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento. A través de la ecuación de continuidad, se establece una corrección en el campo de presiones y se repite todo el proceso hasta que se alcance el criterio de convergencia deseado. Se analizará posteriormente cual es el más adecuado. La Tabla 3-5 recoge los algoritmos más conocidos:

Tabla 3-5 Algoritmos de acoplamiento presión-velocidad

Algoritmo	Características
SIMPLE	Algoritmo básico de acoplamiento presión-velocidad. Robusto.
SIMPLEC	Mejora del SIMPLE. Converge más rápido.
PISO	Añade una segunda corrección basada en las celdas vecinas. Dos pasos (predictor y corrector)
Coupled	Discretiza el gradiente de presión. Limitado a ciertos problemas.

3.1.3.8 Esquemas de discretización

Los esquemas de discretización transforman las ecuaciones diferenciales en sistemas de ecuaciones algebraicas. Al realizar los balances en cada celda, se necesita estimar las magnitudes fluidas en el contorno del volumen. Los esquemas de discretización interpolan las variables fluidas en las caras de la celda a través de los valores de dichas variables en los centroides de las celdas adyacentes llamados nodos. El software utilizado dispone de los esquemas que se muestran en la Tabla 3-6.

Tabla 3-6 Esquemas de discretización disponibles en *Ansys Fluent* para *PBS*

Aplicación	Esquema	Características
Espacio	First order upwind	El valor en la cara de la celda depende de la información aguas arriba. Difusión numérica.
	Second order upwind	El valor en la cara depende de la información de dos puntos: aguas arriba y aguas abajo.
	Power law	Solución exacta del modelo unidimensional.
	QUICK	Sólo mallas hexaédricas. Multidireccional. Considera dos nodos vecinos aguas arriba y uno aguas abajo
Presión	Third order MUSCL	Aplicable a cualquier malla. Más preciso.
	Standard	A través de la discretización espacial.
	PRESTO	Balance entre las celdas vecinas.
	Linear	Media de la presión en las celdas vecinas.
Tiempo	Second order	Similar a Second order upwind.
	Body Force Weighted	Para cuando se conocen las fuerzas másicas.
	First order implicit	Estable respecto al tamaño del paso temporal. Cada paso requiere iteraciones.
Gradiente	Second order implicit	
	Green-Gauss cell based	Media entre los centroides vecinos.
	Green-Gauss node based	Media entre los vértices de la celda.
	Least squares cell based	Variación lineal entre centroides vecinos.

3.1.3.9 Modelos de pared

Cerca de las paredes el patrón de flujo se perturba por la presencia de un sólido en contacto con el fluido dando lugar a la capa límite, una región donde los efectos de la viscosidad son importantes. La capa límite se divide en dos regiones: capa interna, formada por las subcapa laminar y logarítmica, y capa externa. Para caracterizar las subcapas internas se utiliza el parámetro y^+ (Ecuación 3-3).

$$y^+ = \begin{cases} \frac{y_p}{\nu} \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}; & y^+ \leq 11.63 \text{ Subcapa laminar} \\ \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+); & y^+ > 11.63 \text{ Subcapa logarítmica} \end{cases} \quad 3-39$$

y_p es la distancia a la pared del punto de análisis, ρ la densidad del fluido, ν la viscosidad cinemática, τ_w el esfuerzo cortante sobre la pared, κ la constante de von Karman (cuyo valor experimental es 0.4187) y E una constante de integración que depende de la rugosidad de la pared. Entre la subcapa laminar y la logarítmica existe una zona de transición suave. El valor $y^+ = 11.63$ representa la intersección entre los dos tramos de la función.

En la definición del modelo numérico, hay que tener en cuenta que la resolución cerca de las paredes afecta a la validez de la solución.

En Mecánica de Fluidos Computacional se emplean dos técnicas para modelar la región cercana a las paredes:

- Wall functions: La región afectada por la viscosidad (subcapa laminar y capa buffer) no se resuelve, sino que se emplean unas funciones empíricas como nexo entre esta región y la totalmente turbulenta. Esto evita tener que modificar los modelos de turbulencia para tener en cuenta la presencia de las paredes.
- Near-Wall Modeling: Los modelos de turbulencia se modifican para tener en cuenta la existencia de las paredes. De esta forma, es necesario un mallado con suficiente resolución en la región cercana a las paredes para poder resolver la subcapa laminar.

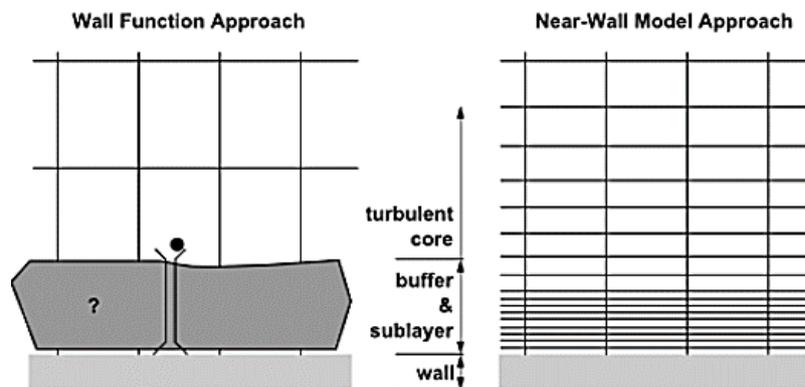


Figura 3-6 Tratamiento de la pared en Mecánica de Fluidos Computacional. Wall Functions (izq.) y Near-Wall model (dcha.) (ANSYS 2012a)

Se emplean técnicas relativas Wall Functions, ya que la estimación del esfuerzo cortante o la transferencia de calor no se tendrán en cuenta. Existen diferentes modelos de pared dependiendo del tamaño de las celdas (Tabla 3-7).

En este trabajo, se utiliza el modelo de pared Standard Wall Functions en modelos de turbulencia RANS, porque es el más adecuado, debido a que no es necesario resolver la subcapa laminar, pues las características más interesantes del flujo se encuentran lejos de ésta, en concreto, en las recirculaciones del flujo en la cámara de combustión.

En caso de usar modelos de turbulencia tipo LES se emplea el tratamiento EWT.

Tabla 3-7 Modelos de pared

Modelo	Condiciones y^+	Observaciones	Requisitos
Standard Wall Functions (SWF)	$300 \geq y^+ \geq 30$ 1º celda en subcapa logarítmica	Flujos con Re altos. No resuelve la subcapa laminar.	Opcional k-e
Non-Equilibrium Wall Functions	Los mismos límites que SWF según los efectos de la presión	Para separación de flujo y estelas.	
Enhanced Wall Treatment (EWT)	$5 \geq y^+ \geq 1$ 1º celda en subcapa laminar	Flujos con Re bajos. Obstáculos y predicciones de caídas de presión.	Obligatorio: LES, transición

3.1.4 Geometría

El modelo geométrico empleado para el quemador de flujo rotante, será el correspondiente al caso test clásico empleado por Roback et al. (1983) descrito en el apartado 2.4.3. Este tipo de problema tiene una amplia bibliografía en el apartado experimental que permitirá validar los resultados numéricos. Se seleccionan los resultados de Palm et al. (2005) para una validación adicional.

La Figura 3-7 muestra los principales elementos del quemador empleado por (Roback et al. 1983). Esta figura ha sido creada con Autodesk Inventor con el objeto de ilustrar la geometría.

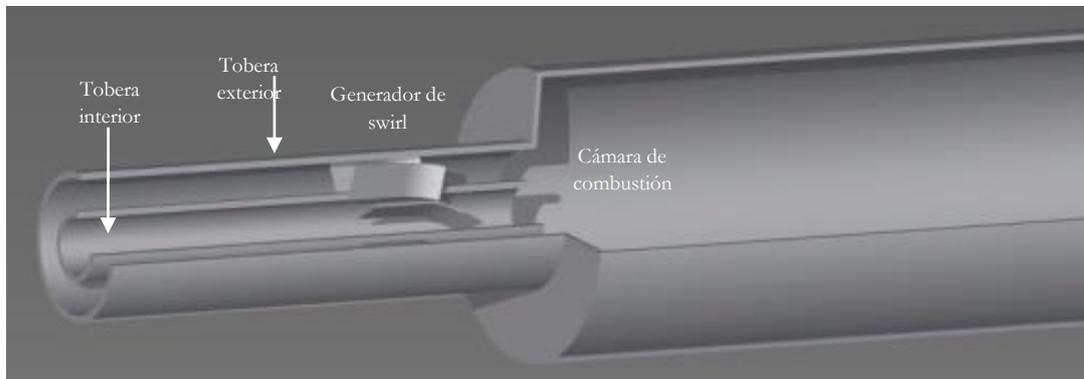


Figura 3-7 Elementos del modelo

Se trata de una geometría muy sencilla que se compone de dos toberas coaxiales, una interior y otra exterior, que descargan a una cámara de combustión caracterizada por una expansión brusca. Las dimensiones características pueden apreciarse en la Figura 3-8.

Las toberas tienen un diámetro exterior de 59 y 25 mm respectivamente y un espesor la más pequeña de 3 mm. No es necesario definir el espesor de la exterior, puesto que se simula la dinámica del fluido dentro del quemador. Las toberas del conducto interior y exterior tienen una longitud de 220 mm y la cámara de combustión de 1016 mm.

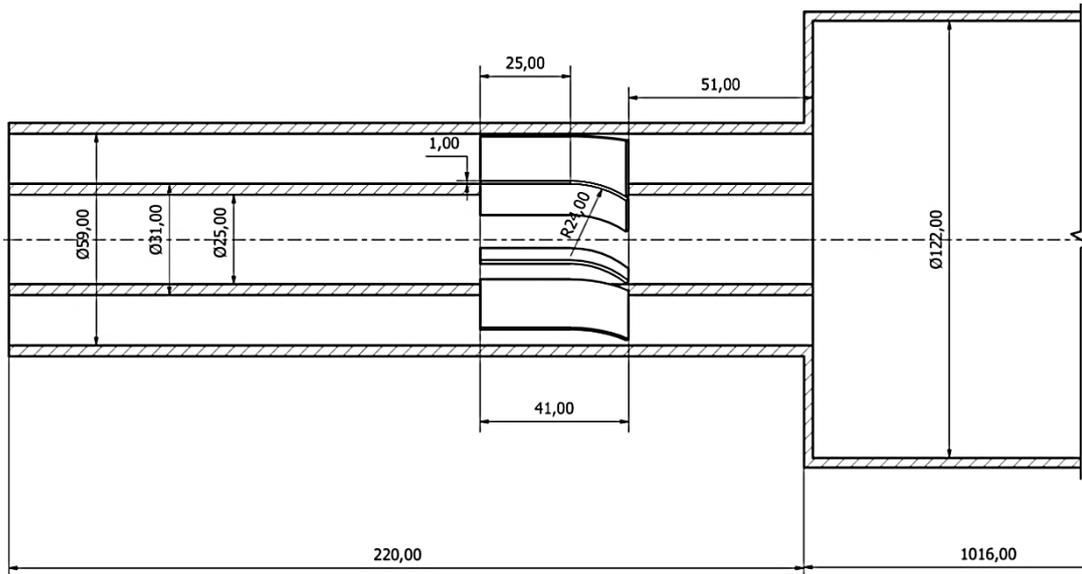


Figura 3-8 Dimensiones del quemador de Roback-Johnson

3.1.4.1 Generador de Swirl

El caso test que se pretende simular (Roback et al. 1983), dispone de un generador de swirl con ocho aletas, de 60° de ángulo entre la dirección tangencial y el borde de salida, con conservación del momento cinético en la dirección radial (Ver apartado 2.4.5). El generador de swirl se coloca a aproximadamente a 51 mm de la entrada a la cámara de ensayo.

Éste produce un vórtice libre de velocidad tangencial inversamente proporcional al radio ($v_\theta \sim 1/r$), por lo que la energía es uniforme en la dirección radial lo que previene la formación de flujos secundarios.

El caso test dispone de aletas torsionadas para conservar uniforme el momento cinético. Puesto que reproducir dicha torsión es complejo y que además se pretende construir un modelo sencillo y con simetría axial del flujo promedio, se han propuesto tres enfoques diferentes en función del grado de complejidad.

- Generador de Swirl idealizado

El primer enfoque, consiste en emplear la teoría unidimensional en la zona del generador de swirl. Para ello, se consideró con un número infinito de aletas de espesor infinitesimal que proporciona un guiado perfecto. A esta zona se le impone una rotación mediante el perfil de velocidades en la condición de entrada.

- Generador de Swirl con aletas planas

Es de construcción sencilla y consiste en una chapa plana inclinada un determinado ángulo respecto al flujo (Figura 3-9). Se coloca un número par de placas planas sin torsión de anchura 1 mm y cuerda de 25 mm en la tobera exterior.

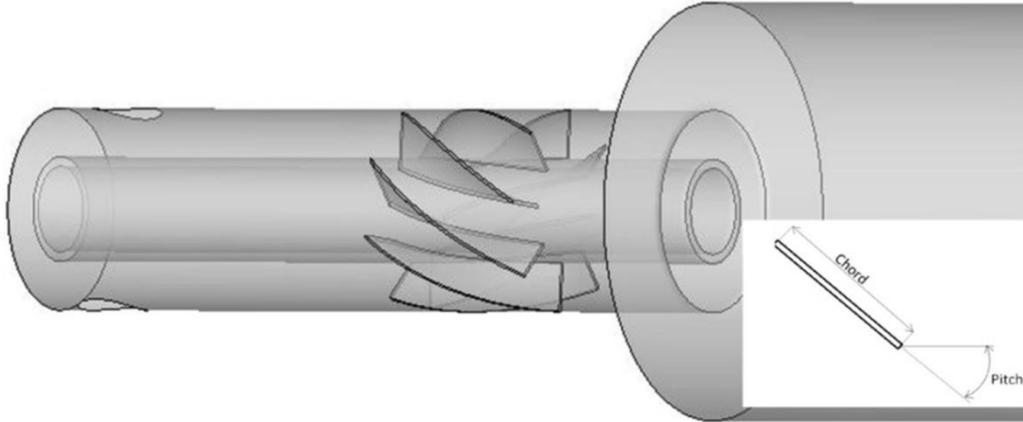


Figura 3-9 Generadores de swirl de placas planas

- Generador de Swirl con aletas curvas

Consiste de una parte recta de 25 mm alineada en el eje axial y una parte curva que corresponde a una porción de circunferencia de 24 mm de radio de curvatura (Figura 3-11) que tendrá tanta longitud como swirl se quiera generar puesto que a medida que la longitud de las aletas crece se impone un mayor giro al fluido en la tobera exterior. Es más eficiente para evitar la pérdida de choque. Tampoco tiene torsión y se usa un número par de aletas.

Este último ha sido diseñado en base a criterios de simplicidad constructiva y a que ha sido utilizado con éxito como álabes del distribuidor de turbinas para OWC en Pereiras (2008) (Figura 3-10).



Figura 3-10 Geometría turbinas OWC (Pereiras 2008)

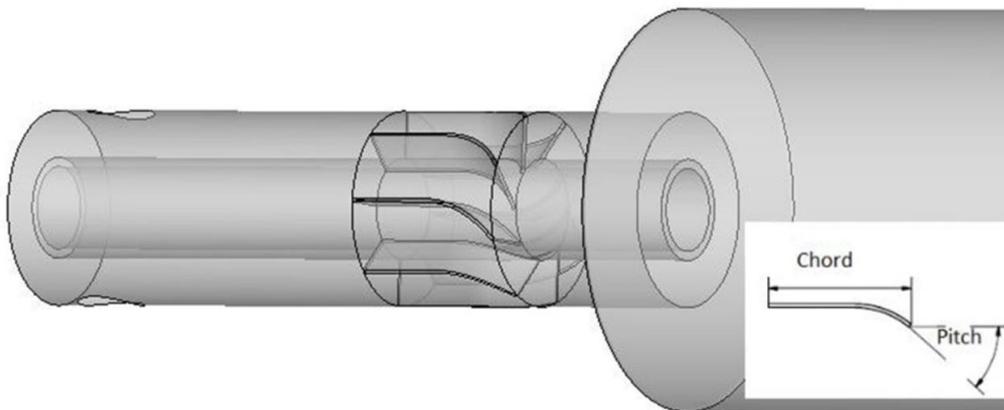


Figura 3-11 Generadores de swirl aletas curvas

3.1.4.2 Difusor

El patrón de flujo está directamente relacionado con la expansión de éste a la salida de las toberas por lo que posteriormente se analizará el efecto en el flujo de la colocación de un difusor. Posteriormente se analizarán difusores con semiángulos desde 30° a 80° (Figura 3-12).

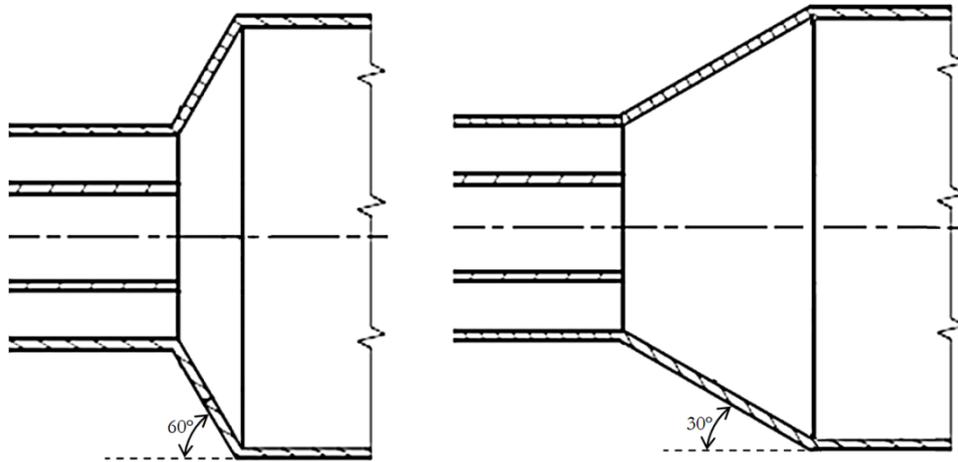


Figura 3-12 Esquema de los difusores en un quemador de flujo rotante. Difusor de semiángulo 60° (izq.). Difusor de 30° (dcha.)

3.1.5 Condiciones operativas

La Tabla 3-8 muestra cuáles son las condiciones del flujo y del fluido consideradas en los modelos de simulación creados con Ansys Fluent y OpenFOAM. El presente capítulo comprende simulaciones isotermas, por lo que el fluido de trabajo será aire únicamente. Las superficies de las condiciones de contorno se indican en el apartado 3.1.7. Se considera que a la salida de la cámara de combustión existe presión atmosférica (101325 Pa).

Tabla 3-8 Condiciones operativas

Condición	Tobera interior	Entrada radial	Tobera exterior	Cámara combustión
Velocidad (m/s)	0.66	4.835	1.541	0.29
Área (m ²)	4.903·10 ⁻⁴	3.183·10 ⁻⁴	1.998·10 ⁻³	1.168·10 ⁻²
Diámetro característico (m)	0.025	0.02	0.028	0.122
Intensidad turbulenta (%)	12	7.5	-	-
Gasto másico (kg/s)	3.964·10 ⁻⁴	1.885·10 ⁻³	3.771·10 ⁻³	4.167·10 ⁻³
Número de Reynolds	1130	6620	3617	2973
Energía cinética turbulenta	0.00310		0.06600	
Disipación turbulenta	0.00567		0.6925	
Densidad (kg/m ³)			1.225	
Viscosidad (kg/(m·s))			1.7894·10 ⁻⁵	

Las condiciones para intensidad turbulenta y la escala característica se basan en los datos proporcionados en el caso de prueba de Roback et al. (1983). Estos valores se usan en el modelo numérico del código Ansys Fluent.

El modelo creado con OpenFOAM necesita además la definición de los valores k y ϵ y en las condiciones de contorno. Éstos se estiman a partir de la componente fluctuante de la velocidad y longitud de escala turbulenta utilizando la ecuación donde c_μ es la constante k - ϵ de valor 0.09. La fluctuación de velocidad se calcula basándose en la intensidad turbulenta.

$$k = \frac{1}{2} u'_i u'_i \tag{3-40}$$

$$\epsilon = \frac{c_\mu^{0.75} k^{1.5}}{l} \tag{3-41}$$

3.1.5.1 Dominio computacional

Después de tener definido el modelo físico se construye el modelo computacional que se va a simular.

En las simulaciones de dinámica de fluidos computacional es necesario simular el volumen fluido y para ello se crea una geometría que corresponda con éste.

Los sólidos no se han creado debido a que no tienen influencia en la simulación CFD. Puesto que no es necesario estudiar las características del flujo en las entradas radiales solo se crea una cara con la forma correspondiente a la entrada radial y se impone como condición de contorno velocidad de entrada. Inicialmente la construcción del dominio computacional se ha realizado con Gambit 2.4.1. (Figura 3-13). Posteriormente se ha realizado mediante Design Modeler siguiendo las recomendaciones del módulo (ANSYS 2012c) perteneciente al paquete de simulación CFD de Ansys. La utilización de Design Modeler en el entorno Workbench de Ansys permite crear un modelo parametrizado para poder realizar análisis de sensibilidad de forma más sencilla.

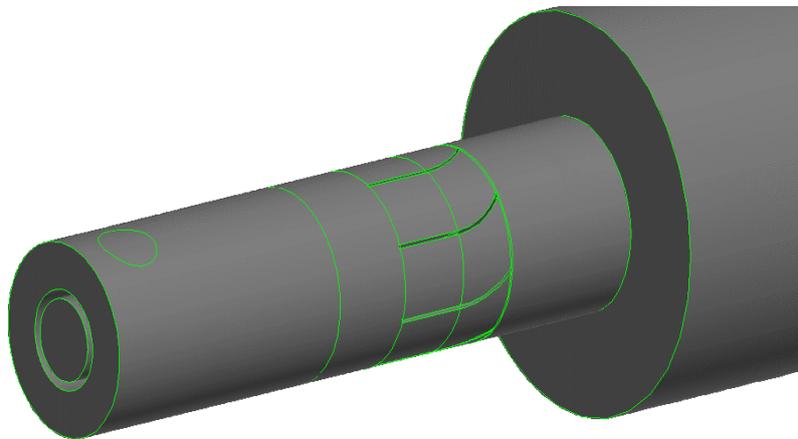


Figura 3-13 Volumen fluido a simular simplificado

3.1.6 Mallado

La resolución por el Método de Volúmenes Finitos exige pasar de un dominio continuo a un dominio discreto. A este dominio discreto se le denomina malla, y debe cumplir ciertas condiciones:

- Ajustarse a las fronteras del dominio de modo que las condiciones de contorno queden representadas de la mejor forma posible.
- Debe estar distribuido localmente con regularidad, sin variaciones bruscas en la densidad de celdas ni elevadas relaciones de aspecto en éstas.
- Donde se espere que haya grandes cambios en las variables espaciales, el mallado debe ser más denso (alta resolución espacial).

Existen dos tipos de mallas según su conectividad: estructuradas y no estructuradas. Los mallados estructurados discretizan mejor las ecuaciones y transmiten mejor la información, pero son difíciles de implementar en geometrías complejas porque son poco flexibles. Las mallas pueden ser estructuradas de celdas hexaédricas; tetraédricas o no estructuradas; mixtas. Las hexaédricas ofrecen mejores resultados y deben usarse con preferencia sobre las tetraédricas, que sin embargo son más fáciles de construir en geometrías complejas.

La construcción de la malla se ha realizado inicialmente con Gambit 2.4.1 y posteriormente con Ansys Meshing siguiendo las recomendaciones de este módulo (ANSYS 2012b) perteneciente al paquete de simulación CFD de Ansys.

A pesar de que la geometría es compleja en la zona cercana a las aletas directrices, en todas las mallas realizadas, se ha conseguido implementar una malla estructurada. El 75% de todo el dominio computacional se ha generado mediante hexaedros regulares, el 25% restante mediante hexaedros irregulares.

Se debe garantizar una calidad de mallado suficiente para que el método numérico sea estable, converja y aporte resultados aceptables. Para evaluar la calidad de las celdas se utiliza el parámetro *equiangle skew* que mide la diferencia respecto al ángulo 90° para hexaedros y 60° para tetraedros

Es recomendable no sobrepasar 0.8 en ningún elemento porque se pueden generar problemas durante el proceso de cálculo e incertidumbres en la solución.

Se han generado numerosas mallas en el presente trabajo hasta encontrar un método de mallado óptimo y rápido. La malla que se muestra en la Figura 3-15 corresponde a un quemador con 8 aletas directrices con un ángulo de salida (geométrico) de 57°, con la simulación de la cámara completa con una longitud de aleta de 41mm (ver Tabla 4-1). Consta de aproximadamente 1.6 millones de celdas hexaédricas, sin celdas con un *equiangle skew* superior a 0.8 y con un 85% de las celdas con un calidad muy alta (*equiangle skew* entre 0 y 0.2, Figura 3-14).

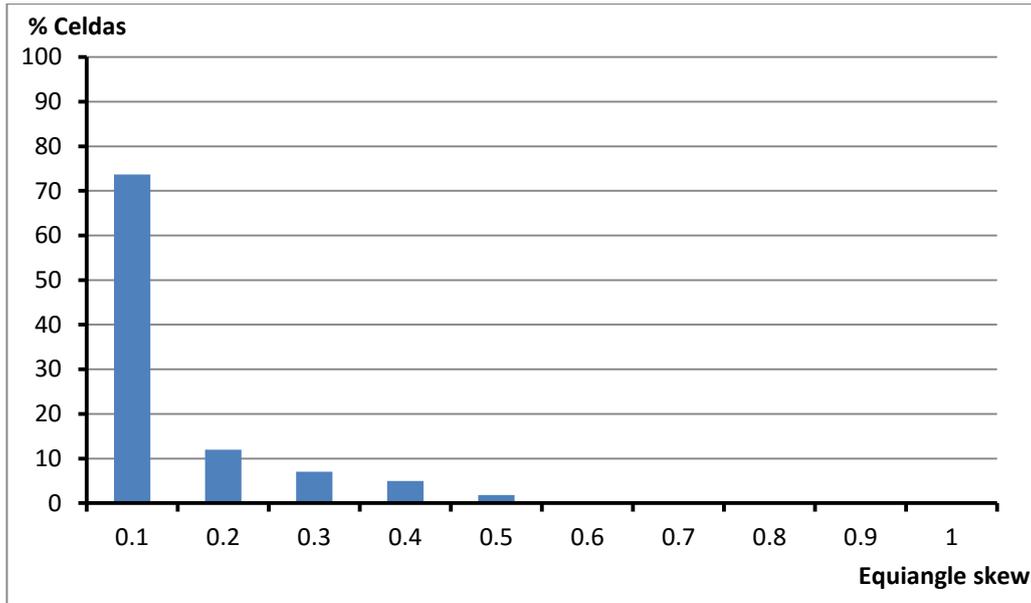


Figura 3-14 Calidad de las celdas en función de *equiangle skew*

Se puede apreciar la calidad del mallado en la Figura 3-15, observándose además como casi todas las celdas de la pared son en su totalidad hexaedros regulares.

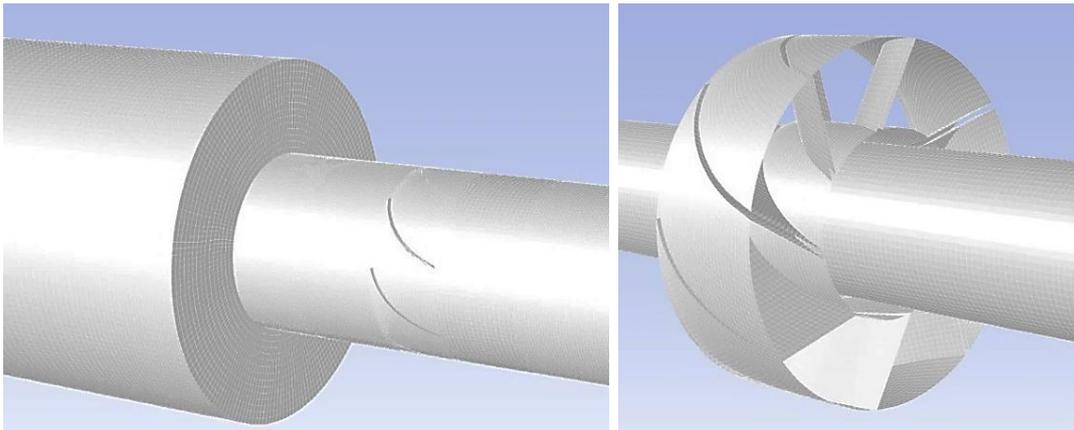


Figura 3-15 Detalles de mallado

Se ha empleado un tamaño característico de mallado de 0.0015 m aproximadamente. La Figura 3-17 muestra la influencia del tamaño característico de la malla en el número de celdas, apreciándose que incluso con las restricciones de tamaños mínimos, máximos y gradientes de malla impuestos, el número de celdas es inversamente proporcional al cubo del tamaño característico.

La Figura 3-16 muestra una sección del mallado de 1.6 millones de celdas. Se aprecia que la malla en la cámara es completamente estructurada y además tiene un gradiente de celdas en la dirección axial puesto que la información importante del flujo está aguas abajo de la expansión brusca de la cámara ya que en estas se zonas es donde se producen las recirculaciones y la llama.

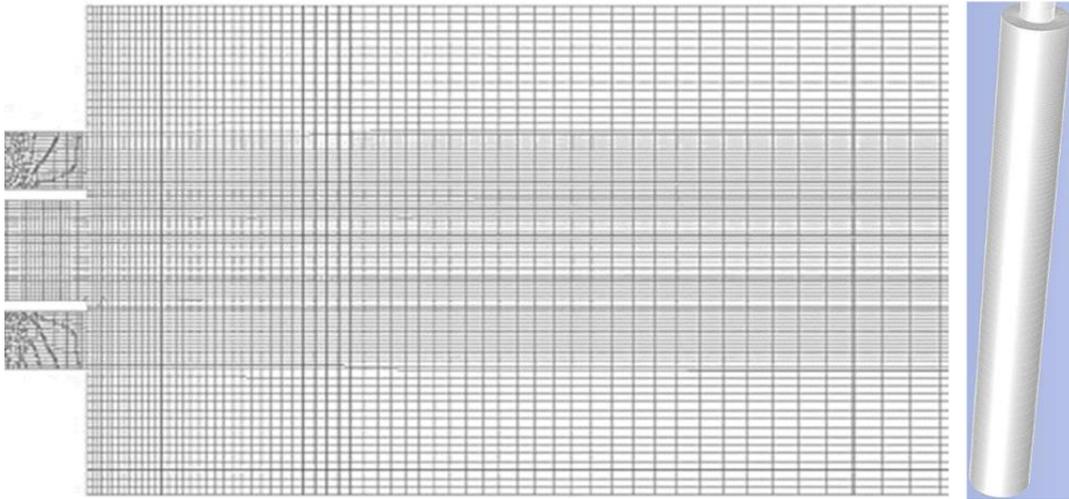


Figura 3-16 Corte del mallado $x=0$ (sup.) Detalle del gradiente de celdas en la dirección axial.

Todas las mallas han sido construidas con celdas hexaédricas y de forma estructurada completamente en la cámara de combustión salvo las que emplean difusores. Las diferencias en los resultados isotermos son mínimas entre celdas hexaédricas y tetraédricas pero las primeras proporcionan un incremento notable de la convergencia. Además para obtener unos resultados aceptables en mallas tetraédricas es necesario reducir los factores de sub-relajación entre un 20% y un 40%.

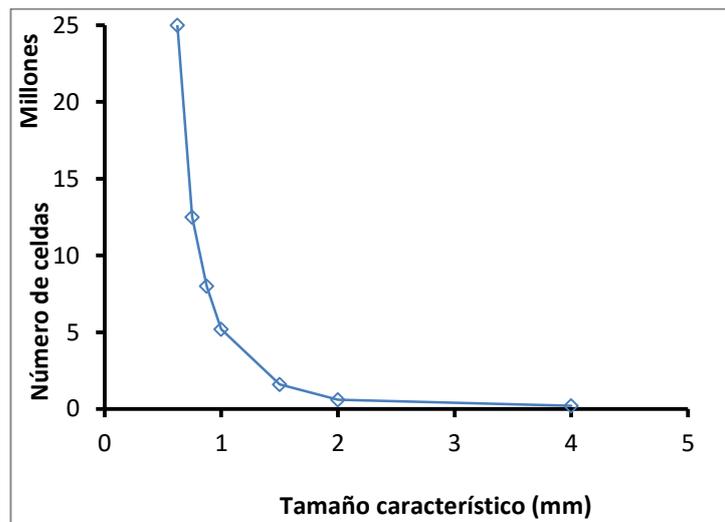


Figura 3-17 Número de celdas en función del tamaño característico de mallado

3.1.7 Condiciones de contorno

Este tipo de quemadores se caracterizan por geometría y condiciones de contorno sencillas pero complejos patrones de flujo asociados.

Se imponen velocidades y condiciones de turbulencia (Tabla 3-8) en la entrada y condición de salida de flujo en la salida. La Tabla 3-9 muestra la geometría de las condiciones de contorno de velocidad de entrada y salida de flujo, mientras que la Tabla 3-10 indica las superficies que son condición de pared.

Tabla 3-9 Condiciones de contorno de velocidad de entrada y salida de flujo

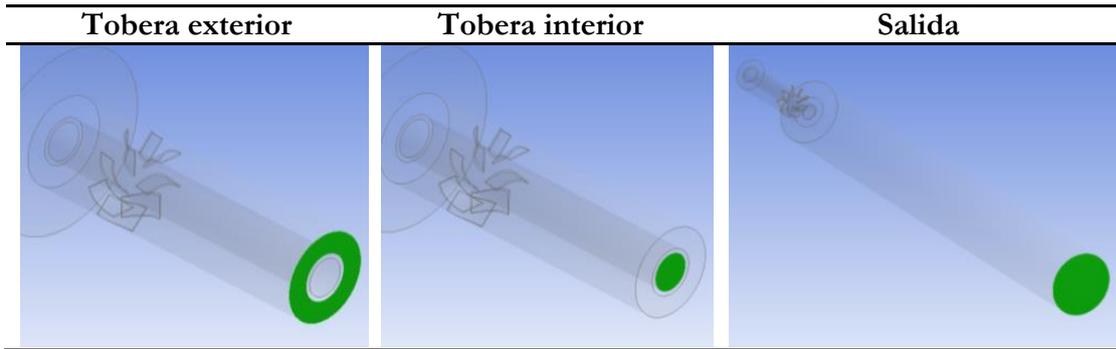
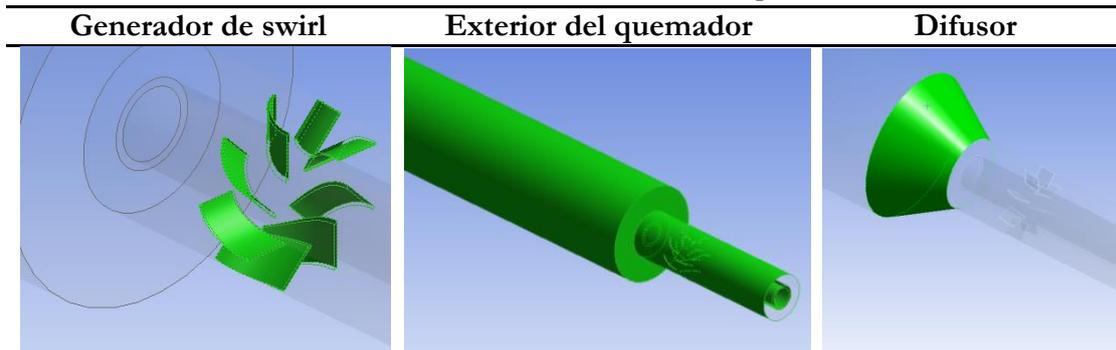


Tabla 3-10 Condiciones de contorno de pared



3.1.8 Casos analizados, hardware y software

Los cálculos se han realizado en un clúster de ordenadores de 8 núcleos en paralelo con procesadores Intel Core i7 a 2.67 GHz con 12 Gb de memoria RAM.

El tiempo de simulación de un modelo de 1.6 millones de celdas aproximadamente ha sido de 24 horas.

La geometría y la construcción de las mallas de los modelos iniciales ha sido generada con Gambit 2.4.1. Posteriormente se ha construido un modelo más robusto y versátil, parametrizado con las dimensiones más importantes del quemador mediante los módulos de Ansys Design Modeler y Ansys Meshing con el objeto de poder realizar en el entorno Workbench un diseño cuidado del generador de swirl y del difusor de la cámara de combustión.

Los software empleados en la resolución del problema son el código CFD comercial de propósito general Ansys Fluent 14.5 y el código libre OpenFOAM. La Tabla 3-11 muestra los modelos numéricos simulados en el presente capítulo.

Tabla 3-11 Modelos numéricos simulados

Id. Mod. Num.	Tipo análisis	Característica	Swirl	Gen. swirl	Código CFD
M1	Ind. Mallado	0.2·10 ⁶ celdas	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M2	Ind. Mallado	0.6·10 ⁶ celdas	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M3	Ind. Mallado	1.66·10 ⁶ celdas	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M4	Ind. Mallado	2.8·10 ⁶ celdas	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M5	Ind. Mallado	7.5·10 ⁶ celdas	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M6	Turbulencia	k-ε Standard	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M7	Turbulencia	k-ε RNG	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M8	Turbulencia	k-ε Realizable	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M9	Turbulencia	k-ω Standard	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M10	Turbulencia	k-ω SST	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M11	Turbulencia	Spalart-Allmaras	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M12	Turbulencia	DES (Spalart Allmaras)	0.45	Ideal	Ansys Fluent
M13	Turbulencia	Turbulent mixing lenght	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M14	Turbulencia	Spalart-Allmaras	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M15	Turbulencia	Low Re k-ε	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M16	Turbulencia	Standard k-ε	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M17	Turbulencia	Realizable k-ε	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M18	Turbulencia	RNG k-ε	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M19	Turbulencia	RNG k-ε swirl dom.	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M20	Turbulencia	Standard k-ω	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M21	Turbulencia	k-ω SST	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M22	Turbulencia	Transition K-Kl- ω	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M23	Turbulencia	Transition SST	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M24	Turbulencia	v2f	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M25	Turbulencia	Reynolds Stress (st- ω)	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M26	Turbulencia	Reynolds Stress (lin. P. st.)	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M27	Turbulencia	DES (Spalart Allmaras)	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M28	Turbulencia	LES (Smagorinsky-Lilly)	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M29	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =5	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M30	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =0.8	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M31	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =0.2	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M32	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =0.04	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M33	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =0.01	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M34	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =0.005	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M35	Turbulencia	RNG k-ε sw. dom. α _s =0.001	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M36	Turbulencia	RNG k-ε sw.dom. α _s =10 ⁻⁵	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M37	Discr. Mov.	<i>First Order Upwind</i>	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M38	Discr. Mov.	<i>Second Order Upwind</i>	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M39	Discr. Mov.	<i>Power Law</i> (Potencial)	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M40	Discr. Mov.	QUICK	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M41	Discr. Mov.	<i>Third Order MUSCL</i>	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M42	Discr. P	Standard	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M43	Discr. P	PRESTO	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M44	Discr. P	Linear	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M45	Discr. P	Second order	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M46	Discr. P	Body Force Weighted	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M47	Acopl. P-V	PISO	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M48	Acopl. P-V	SIMPLE	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M49	Acopl. P-V	SIMPLEC	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M50	Acopl. P-V	COUPLED	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M51	Validación	Exp.-Palm	0.6	Curvo	Ansys Fluent
M52	Validación	Exp.-Palm	1.2	Curvo	Ansys Fluent
M53	Validación	Exp-Roback	0.45	Curvo	Ansys Fluent
M54	Validación	Exp-Roback	0.45	Curvo	OpenFOAM
M55	Validación	Exp-Roback	0.45	Plano	Ansys Fluent
M56	Validación	Exp-Roback	0.45	Plano	OpenFOAM

3.2 Optimización modelo numérico

Una vez presentado el modelo numérico se analizan las características óptimas de éste. Se muestran los parámetros más importantes de análisis del quemador, se analiza cual es la mejor malla, modelo turbulencia RANS, modelo de discretización y acoplamiento presión velocidad. Son necesarios 52 casos para determinar el modelo óptimo. Esto lo que pone de manifiesto la complejidad numérica relacionada con el diseño de experimentos, simulación y postprocesado de modelos.

3.2.1 Parámetros de análisis

3.2.1.1 Número de swirl

Se indicó en el capítulo 2 que el número de swirl es un parámetro fundamental que caracteriza la rotación del chorro anular. La definición teórica se indica en ecuación 2-10. Su evaluación no es sencilla y existen varias correlaciones o métodos para evaluarla.

El primero de ellos consiste en considerar que el flujo es subsónico, que la densidad no varía a través del radio y que el gasto másico que atraviesa el conducto puede relacionarse en la integral con el promediado en masa. Basándose en las anteriores hipótesis, el número de swirl se puede calcular de forma más sencilla en un código CFD según la ecuación 3-42. v_θ y v_z son la velocidad tangencial y axial respectivamente y R_m el radio medio.

$$S = \frac{\text{Pr omediado Másico } (v_\theta \cdot r)}{\text{Pr omediado Másico } (v_z \cdot R_m)} \quad 3-42$$

Se ha evaluado el número de swirl en varias posiciones axiales desde la salida de las aletas directrices, hasta la entrada a la cámara (Figura 3-18). Los resultados indican que éste apenas varía desde la salida de las aletas hasta la entrada de la cámara (Como máximo la variación entre el máximo y mínimo número de swirl obtenido es de un 4.5%).

Todas las estimaciones del número de swirl se harán siempre a la entrada de la cámara de combustión.

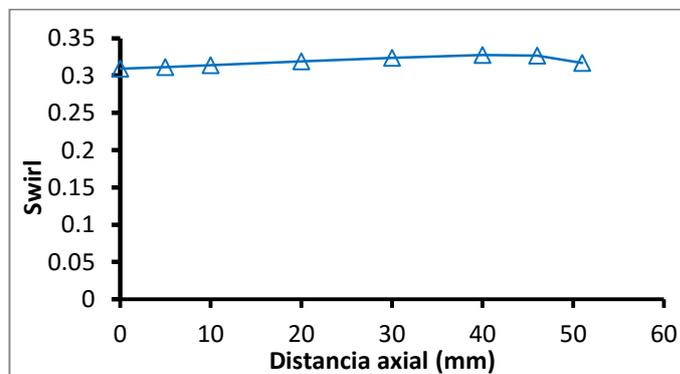


Figura 3-18 Evolución del número de swirl en dirección axial

Existen otras correlaciones como la desarrollada por Sheen et al. (1996) que indica que el número de swirl depende del cociente del promedio de la velocidad tangencial entre el promedio de la axial.

$$S = 0.75 \frac{\overline{u_\theta}}{\overline{u_z}} \quad 3-43$$

Otras correlaciones en cambio pueden evaluar el número de swirl sin resolver el flujo, empleando relaciones geométricas del generador de swirl como el ángulo de salida de las aletas (α) (Oystein, 2004). d_h y d_s son el diámetro interior y exterior del generador de swirl.

$$S = \frac{2}{3} \left(\frac{1 - (d_h / d_s)^3}{1 - (d_h / d_s)^2} \right) \cdot \tan(\alpha) \quad 3-44$$

Otras correlaciones dependientes de la geometría se resumen en Galley et al. (2011) o Durox et al. (2013).

A continuación se evalúa el número de swirl que resulta de las correlaciones de las ecuaciones 3-42, 3-43 (Sheen et al, 1996), 3-44 (Oystein, 2004) sobre un generador de swirl de placas planas y otro de aletas curvas. Dichas correlaciones se denotan en las gráficas posteriores como C1, C2 y C3 respectivamente.

Los valores del número de swirl obtenido según cada correlación y generador de swirl se muestran en la Tabla 3-12. La Figura 3-19 recoge la comparativa del ángulo de salida en función del número de swirl para los dos generadores de swirl empleados y las correlaciones C1, C2 y C3. Las diferencias entre correlaciones son mucho más acusadas para números de swirl altos.

Se aprecia que C2 subestima entre un 15 y 30% de número de swirl en referencia a C1 o C3. El ajuste entre C3 y C1 es notablemente mejor. En generadores de swirl de placas planas las correlaciones C1 y C3 son próximas mientras que para aletas curvas existen diferencias para altos número de swirl.

Tabla 3-12 Número de swirl de generadores de rotación de placas planas y curvas según las correlaciones C1, C2 y C3.

Generador de swirl	Ángulo (°)	Swirl (C1)	Swirl (C2)	Swirl (C3)
Placas planas	24	0.35	0.29	0.27
	42	0.55	0.45	0.55
	62	1.15	0.88	1.14
Aletas curvas	29	0.30	0.21	0.34
	38	0.44	0.35	0.47
	45	0.57	0.38	0.61
	57	0.72	0.50	0.93
	62	0.82	0.60	1.13
	72	1.22	0.87	1.86

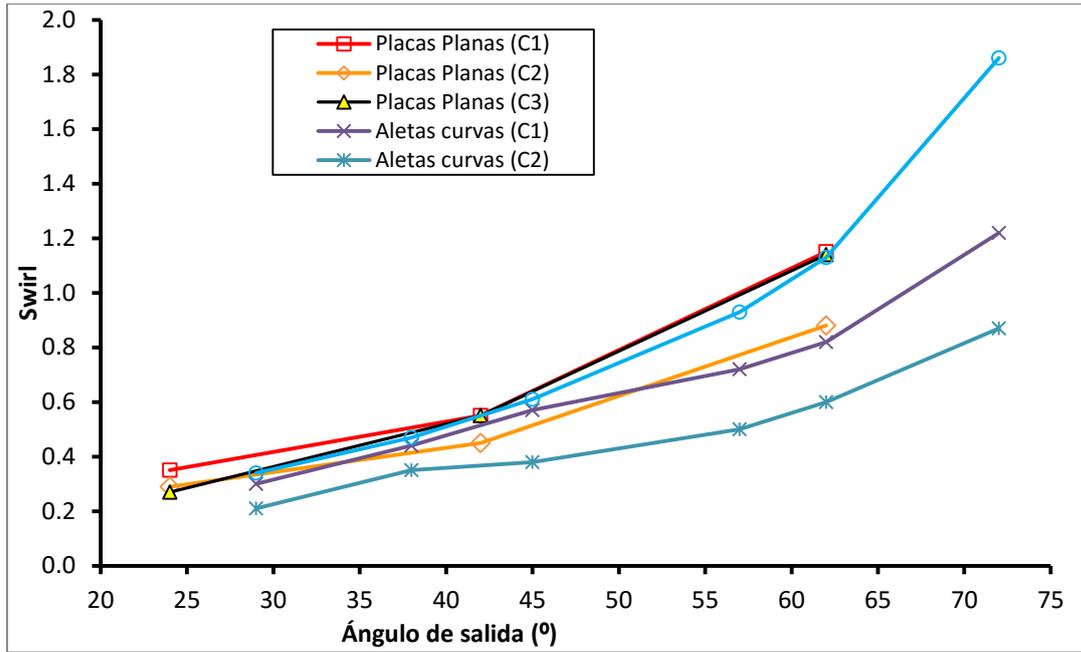


Figura 3-19 Influencia del ángulo de salida de las aletas en el número de swirl para un generador de swirl de placas planas y de placas curvas (correlaciones C1, C2 y C3)

La correlación C3 en aletas curvas y placas planas es coincidente, pues no considera la geometría de la aleta sino que solo depende de los diámetros interior y exterior del generador de swirl y del ángulo de salida de la aleta.

En Durox et al. (2013) se analiza el efecto del número de swirl en la dinámica de la llama y se desarrolla una correlación propia para evaluar la rotación que proporcionan los resultados experimentales de su generador de swirl (se denota por C4 en las gráficas). Ésta se compara con los resultados de número de swirl obtenidos mediante integración directa (en las gráficas Int.) con la correlación de Galley et al. (2011) (denotado por C5) y con la correlación de Sheen et al (1996) (C2). Los valores del número de swirl obtenido según cada correlación y generador de swirl se muestran en la Tabla 3-13.

Tabla 3-13 Número de swirl de generadores de rotación experimental (Durox et al. 2013), de placas planas y de aletas curvas según las correlaciones C1, C2 y C3.

Ángulo (°)	EXP (Int.)	EXP (C2)	EXP (C4)	EXP (C5)
23	0.19	0.22	0.15	0.29
29	0.26	0.30	0.19	0.37
35	0.32	0.37	0.24	0.48
39	0.37	0.41	0.27	0.55
43	0.40	0.43	0.32	0.63
46	0.44	0.47	0.35	0.70
52	0.50	0.52	0.43	0.85
59	0.56	0.58	0.55	1.12
61	0.65	0.66	0.61	1.22

La Figura 3-20 recoge la comparativa del ángulo de salida de las aletas frente al número de swirl para un generador de swirl de placas planas, uno de aletas curvas y uno experimental Durox et al. (2013) según las correlaciones C1, C2, C3, C4, C5 e integración directa.

Las curvas sin marcadores y líneas discontinuas corresponden a resultados del generador de swirl experimental realizados en Durox et al. (2013).

Para ángulos de salida altos el número de swirl aumenta significativamente en el generador de swirl experimental, coincidiendo con la tendencia del generador de swirl de aletas curvas.

La principal conclusión es que la estimación del número de swirl es compleja y depende de la correlación empleada siendo las diferencias más acusadas cuanto mayor es el número de swirl. El número de swirl se calculará con la ecuación 3-42 salvo que se indique lo contrario.

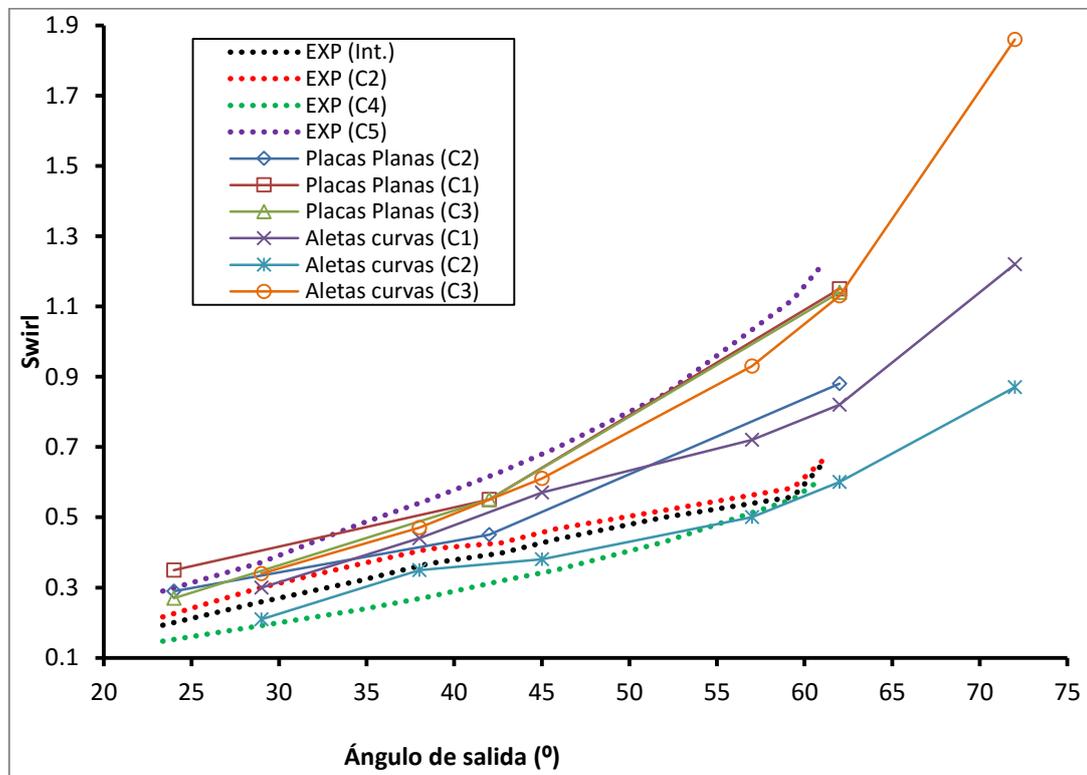


Figura 3-20 Influencia del ángulo de salida de las aletas en el número de swirl para un generador de swirl de placas planas, uno de placas curvas y uno experimental (Durox et al., 2013) según las correlaciones C1, C2, C3, C4, C5 e integración directa.

3.2.1.2 Número de skewness

No se han mostrado valores del número de skewness ya que no se han encontrado variaciones importantes de éste en los modelos, ya que todos ellos presentan simetría axial. En el análisis experimental realizado en Roback et al. (1983) se obtiene también simetría axial. Se muestra en 2.4.1 la definición del número de skewness.

3.2.1.3 Zonas de recirculación

Para el análisis de resultados se ha de emplear un patrón característico que permita comparar distintas características de cada diseño o modelo. En el problema a caracterizar las zonas de recirculación son uno de los conceptos más interesantes puesto que condicionan el tamaño, posición y forma de la llama. Además la obtención de forma numérica de las zonas de recirculación permitirá comparar como se modifican éstas variando otros parámetros.

El centro de las zonas de recirculación se caracteriza por tener una velocidad nula en dirección al eje del quemador (Figura 3-21). En el modelo la dirección axial es z y se considera como origen de coordenadas la salida del flujo de las aletas del generador de swirl. Existe renovación del fluido en las zonas de recirculación pero es pequeña. En base a lo anterior el centro de la zona de recirculación será aquella en la que la velocidad axial sea nula. La metodología de obtención de estas zonas es la siguiente:

Se crea una iso-superficie con velocidad en dirección axial nula y se corta esa superficie con un plano longitudinal. Se aprecian de forma clara la zona de recirculación interior o IRZ con forma de bulbo y la zona de recirculación exterior o ORZ con forma toroidal.

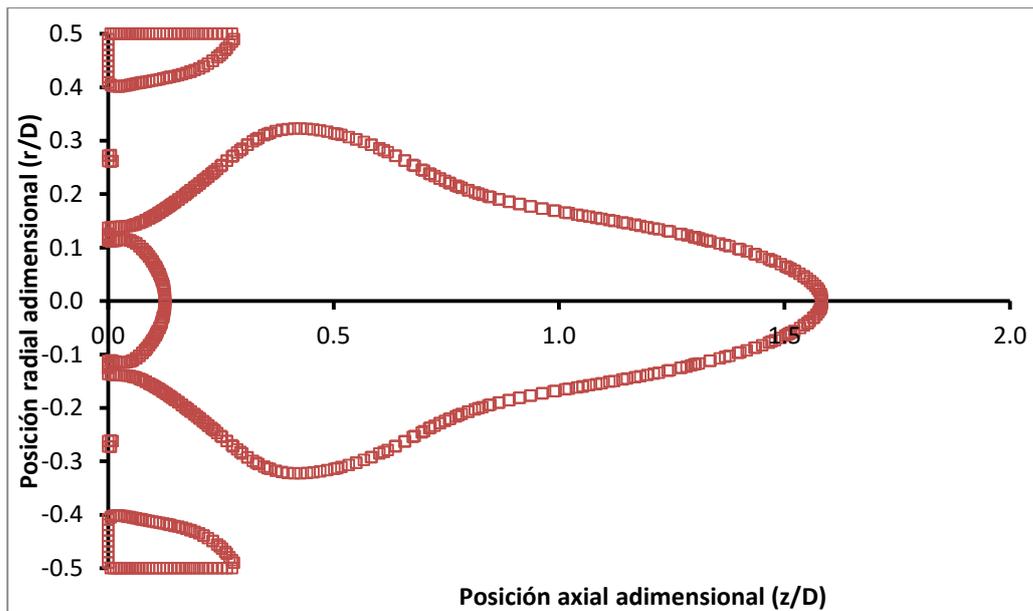


Figura 3-21 Zona de velocidad axial nula. Centro del núcleo del torbellino.

3.2.2 Análisis de independencia del mallado

El estudio de la influencia del mallado sobre los resultados es el primer análisis que se llevará a cabo para así poder establecer un tamaño de celdas óptimo para todas las posteriores simulaciones.

A medida que aumenta el número de celdas, se tiene una malla más densa y fina, con la que poder estimar mejor los fenómenos que sufra el flujo. Este tamaño está

limitado por la capacidad de cálculo y por tanto se buscará un tamaño de malla que no sea excesivamente grande pero haga los resultados independientes de ésta.

Para ello se han simulado 5 mallas con 200.000, 600.000, 1.660.000, 2.800.000 y 7.000.000 celdas que corresponden con los casos M1, M2, M3, M4 y M5. Las 5 simulaciones se realizarán con la misma configuración para estudiar el efecto del mallado. Ésta se detalla en 3.2.6 y corresponde a la configuración que se irá desarrollando como óptima a lo largo del capítulo.

Las variables cuya influencia se estudiará en las cinco mallas (Tabla 3-14) son:

- Número de swirl
- La posición y tamaño de la zona de recirculación interior.
- Perfil de velocidad axial en función del radio

Tabla 3-14 Simulaciones realizadas sobre la influencia de la malla

Malla	Celdas	Iteraciones realizadas	Tiempo CPU (horas)	Swirl	Tamaño axial de la IRZ (L_{IRZ}/D)
1	200000	5000	1.5	1.194	1.74
2	600000	6000	4	1.217	1.70
3	1660000	8000	20	1.233	1.60
4	2800000	13000	35	1.227	1.59
5	7500000	15000	400	1.224	1.58

La Figura 3-22 muestra cómo a medida que aumenta el número de celdas, el número de swirl y el tamaño axial de la IRZ se mantienen casi constantes. Los resultados de cada malla de la Figura 3-22 se presentan relativos a los de la malla más fina.

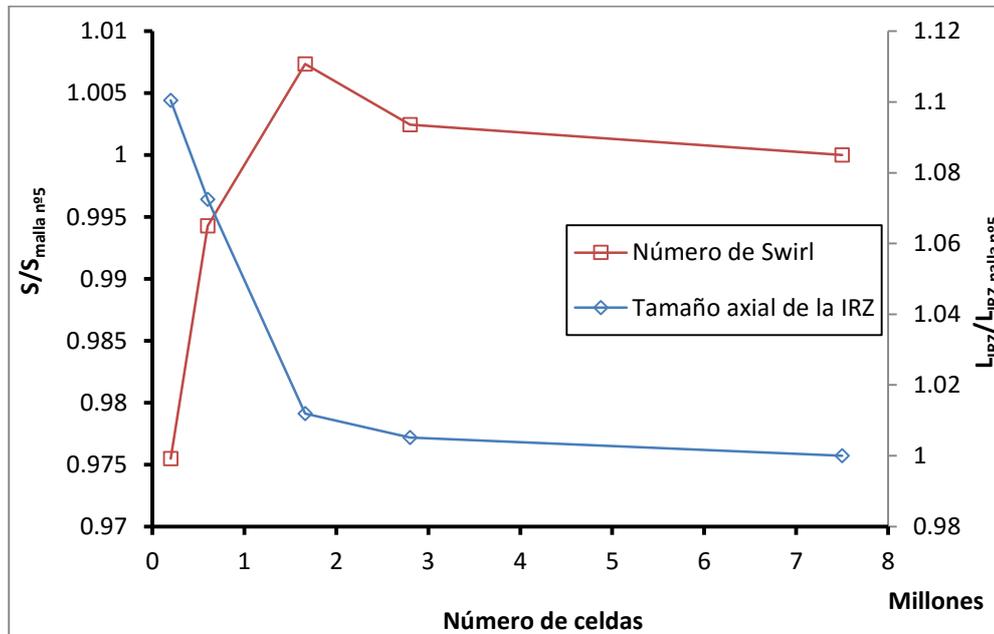


Figura 3-22 Número de swirl y tamaño axial de la IRZ en función del número de celdas

Si se obtiene la zona de recirculación interior para los cinco casos simulados (Figura 3-23) se aprecia que los casos de 200.000 y 600.000 tienen una IRZ significativamente distinta a los demás mientras que a partir de 1.660.000 celdas los resultados no se modifican apenas, por lo que podemos concluir que este tamaño es óptimo respecto a este criterio.

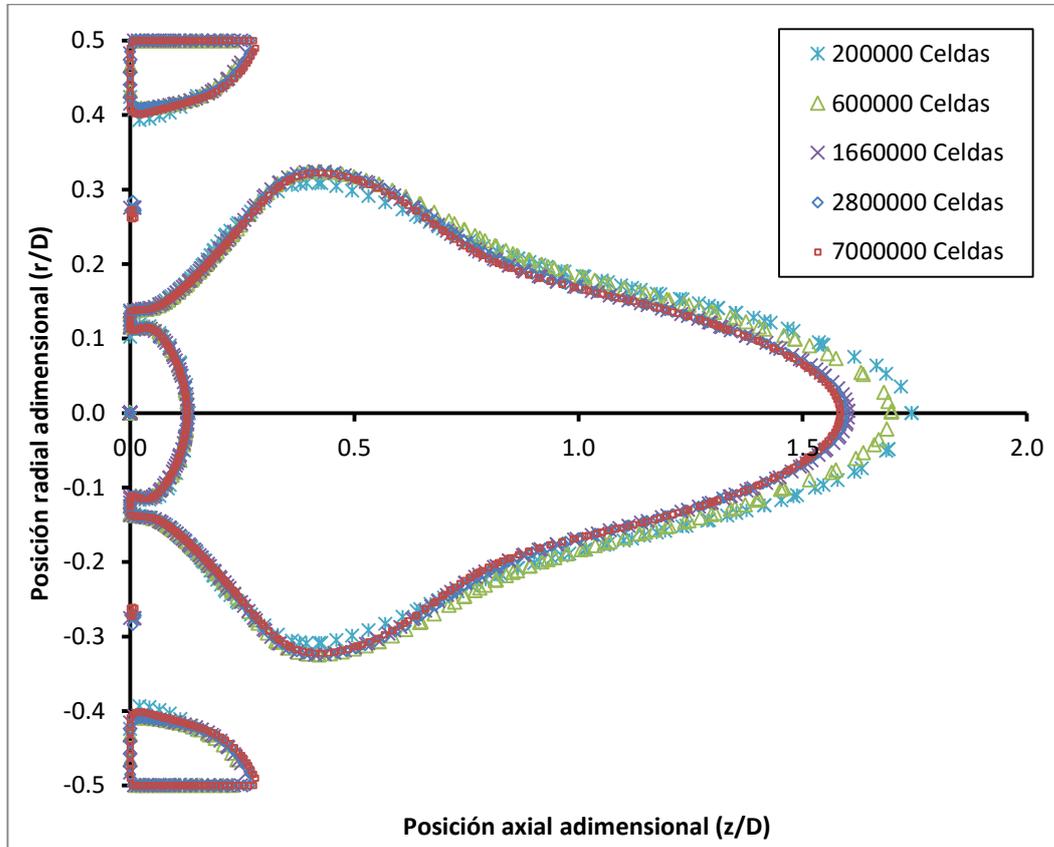


Figura 3-23 Influencia del número de celdas en el tamaño y posición de la zona de recirculación

Por último se analiza cuál es la influencia de la malla en los perfiles de velocidad axial en función del radio para las posiciones axiales adimensionales 0.01D, 0.2D, 0.4D y 0.8D (Figura 3-24).

Se puede concluir que la malla de 200.000 celdas no representa bien la realidad puesto que sobreestima y subestima la velocidad en muchas zonas. La malla de 1.660.000 captura bien los gradientes de velocidad en todas las secciones y comete unos errores mínimos solo existentes en la zona donde la velocidad es máxima por lo que será considerada como óptima.

El análisis de influencia de la malla realizado es válido para modelos RANS isotermos. Los modelos LES necesitan un mayor refinado para capturar las escalas más pequeñas de la turbulencia.

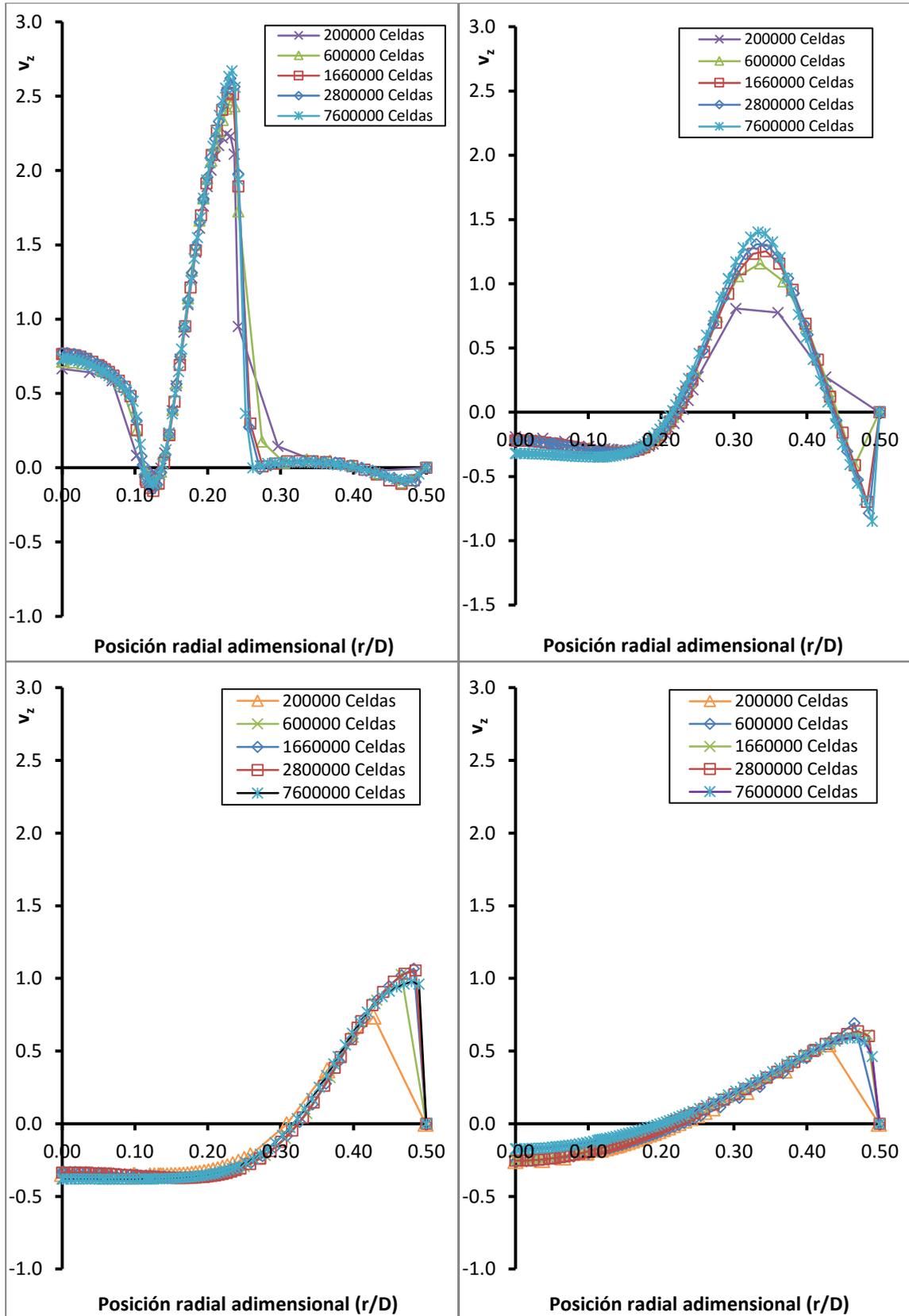


Figura 3-24 Perfil de velocidad axial en función del radio y el tamaño de la malla. Secciones axiales 0.01D, 0.2D, 0.4D y 0.8D

3.2.2.1 Error de discretización

El error de discretización en una simulación CFD se puede definir como la diferencia entre el valor obtenido en el modelo numérico discretizado y la solución exacta de las ecuaciones diferenciales del modelo en continuo.

Habitualmente no se conoce la solución exacta de las ecuaciones diferenciales por lo que el error de discretización no puede calcularse de forma exacta. Una manera de estimar error de discretización es emplear el método basado en la extrapolación de Richardson (Roache, 1994).

El error de discretización tiende a disminuir a medida que disminuye el tamaño de la malla. Si se comparara el valor de una variable en un mallado inicial (a) con el valor de la misma variable mediante otro mallado más fino (b), se puede expresar el error de discretización mediante la ecuación 3-45 siendo r_m la relación existente entre el tamaño de la malla fina y la gruesa y p siendo el orden del esquema de discretización que en el caso aplicado es 2.

$$\varepsilon \approx \frac{(\theta_b - \theta_a) / \theta_b}{r_m^p - 1} \quad 3-45$$

Dos parámetros importantes en el análisis son el número de swirl y la longitud axial de la zona recirculación. Si se calcula el error relativo de discretización para cada malla respecto al tamaño axial de la IRZ y al número de swirl, se obtiene que la malla de 1.6 millones de celdas proporciona un error de discretización de un 0.9% y 0.2% respectivamente mientras que la malla de 7 millones proporciona un error de discretización de 0.1% y 0.04% respectivamente. Se considera que el error de discretización de la malla de 1.6 millones es asumible. Además el coste computacional es razonable.

3.2.3 Modelo de turbulencia

Para conseguir unos resultados fiables en la simulación es muy importante seleccionar como va a ser modelada la turbulencia. Además como se ha comentado anteriormente la bondad de una correcta simulación del quemador de flujo rotante está determinada por la caracterización óptima de la turbulencia.

El código CFD Ansys Fluent posee numerosas opciones para la simulación de la turbulencia. Se van a emplear los modelos más importantes que dispone el código.

Se han realizado las iteraciones necesarias para obtener residuales y propiedades uniformes en todos los modelos. Se obtiene el perfil de velocidad a lo largo de la posición radial adimensional y se comparan dichos estos resultados frente a los experimentales.

Se ha empleado dos enfoques distintos. El primero de ellos consiste asumir la hipótesis de guiado perfecto y emplear un generador de swirl ideal. Los resultados de este enfoque se comparan frente a los experimentales de Roback & Johnson con $S=0.45$. Se simulan modelos $k-\varepsilon$, $k-\omega$, Spalart-Allmaras y DES.

Una vez determinado que el modelo ideal proporciona resultados razonables se aumenta el grado de precisión modelando el generado de swirl en 3D con detalle. Estos resultados se contrastan con los experimentales de Palm et al. (2005) para $S=1.2$. Se selecciona una sección axial adimensional de $0.01D$. En esta zona el perfil de velocidad debe aproximarse más a los resultados experimentales. La Tabla 3-15 muestra los modelos de turbulencia simulados mediante el segundo enfoque.

Por último se determina un modelo de turbulencia óptimo y se comparan los resultados de dicho modelo con los experimentales de Roback et al. (1983).

Tabla 3-15 Modelos de turbulencia simulados

Ecuaciones	Modelo	Variante
0	Turbulent mixing length	-
1	Spalart-Allmaras	Vorticity Based
2	k- ϵ	Swirl Dominated
		Low Re
		Standard
		RNG
		Realizable
	k- ω	Standard
		SST
3	Transition K-kl-w	-
4	Transition SST	-
	V2F	-
7	Tensiones de Reynolds	Stress Omega
		Linear Pressure Strain
		Quadratic Pressure Strain
-	LES	Smagorinsky
-	DES	Spalart-Allmaras

3.2.3.1 Aproximación unidimensional

El primer enfoque supone la teoría unidimensional en la zona del generador de swirl con el fin de establecer los patrones de recirculación asociados con el swirl del chorro de la tobera exterior.

Para ello se consideró con un número infinito de aletas de espesor infinitesimal que proporciona un flujo guiado perfecto. Esta hipótesis se lleva a cabo mediante el uso de una malla deslizante con rotación y produce un vórtice forzado perfecto.

Se resumen en la Tabla 3-16 los parámetros globales de las simulaciones que consideran el enfoque unidimensional en el generador de swirl, el error de discretización cometido frente a los resultados de Roback et al. (1983) y la identificación de los modelos simulados.

El número de iteraciones representa el mínimo necesario para garantizar que todos los residuos alcancen el comportamiento en estado estable. Los residuos de masa mínima pueden compararse, ya que todos los modelos que correspondan a la misma malla.

El perfil de velocidad a lo largo de una dirección radial cerca de la salida de la tobera muestra un cambio característico de curvatura cerca del radio nulo, por lo tanto, hay una columna que indica si el modelo logra predecirlo.

Tabla 3-16 Modelos de turbulencia simulados. Caso unidimensional

Modelo	Núm. iteraciones	Min. residual masa	Captura la curvatura r=0	Máximo error discretización (%)
K-ε Standard (M6)	25090	$7.43 \cdot 10^{-8}$	NO	61
K-ε RNG (M7)	16250	$9.17 \cdot 10^{-8}$	OK	46
K-ε Realizable (M8)	30760	$1.06 \cdot 10^{-6}$	NO	58
K-ω Standard (M9)	18790	$6.59 \cdot 10^{-6}$	OK	54
K-ω SST (M10)	28440	$8.20 \cdot 10^{-8}$	NO	58
Spalart-Allmaras (M11)	38150	$6.81 \cdot 10^{-8}$	NO	92
DES (M12)	21620	$1.12 \cdot 10^{-3}$	OK	34

Por último, los errores de discretización se definen como el máximo del valor absoluto de la diferencia entre los valores experimentales de Roback et al. (1983) y los numéricos.

Teniendo en cuenta los errores de convergencia y de discretización el mejor comportamiento son los de la k-ε RNG y DES. Es importante notar que el valor del error es máximo, se trata de una aproximación unidimensional y que la evaluación del número de swirl es compleja y variable (ver apartado 4.2.1.3.).

3.2.3.2 Generador de swirl 3D

Una vez se ha simulado de forma simplificada el flujo en un quemador de flujo rotante con éxito, se desarrolla un modelo más detallado que consiste en la reproducción del caso isoterma analizado por Palm et al. (2005) con un generador de swirl 3D. En este caso un generador de swirl con aletas curvas se modela y se simulan un amplio rango de modelos de turbulencia.

Los modelos de turbulencia analizados son los siguientes Turbulent mixing length (M13), Spalart-Allmaras (M14), Low Re k-ε (M15), Standard k-ε (M16), Realizable k-ε (M17) RNG k-ε, (M18), RNG k-ε swirl dom. (M19), Standard k-ω (M20), k-ω SST (M21), Transition K-Kl- ω (M22), Transition SST (M23), v2f (M24), Reynolds Stress (st- ω) (M25), Reynolds Stress (lin. P. st.) (M26), DES (Spalart Allmaras), (M27) y LES (Smagorinsky-Lilly), (M28). Las características de dichos modelos se resumen en la Tabla 3-11.

En la Figura 3-25 se comparan los modelos de turbulencia indicados en la Tabla 3-15 frente a resultados experimentales de Palm et al. (2005). Tanto las posiciones axiales como las radiales se adimensionalizan con el diámetro de la cámara.

El modelo de longitud de mezcla turbulenta a pesa de ser muy simplificado (es un modelo de 0 ecuaciones) predice bien la velocidad máxima en la parte exterior pero no es capaz de predecir la tendencia del flujo en la parte correspondiente a la tobera

interior. El modelo Spalart-Allmaras se ajusta mejor en posiciones radiales pequeñas mientras que para posiciones radiales grandes sobrestima la velocidad.

La comparativa de modelos $k-\epsilon$ pone de manifiesto tendencias similares en los cinco modelos analizados. Las tendencias del modelo de bajo Reynolds son similares a las del modelo de longitud de mezcla turbulenta ya que el Reynolds es cercano a 3000. La modificación para flujos rotantes del modelo $k-\epsilon$ RNG presenta buenos resultados y además dispone de un parámetro que regula la intensidad de rotación. Dicho parámetro será optimizado posteriormente.

Los modelos $k-\omega$ tienen problemas en posiciones radiales pequeñas ya que sobreestiman y subestiman la velocidad axial considerablemente.

Se han experimentado problemas de convergencia con los modelos de tensiones de Reynolds. Aunque este modelo tiene potencial para representar correctamente los flujos turbulentos y rotantes, esto no se traduce en una mejor precisión. El Submodelo Stress Omega no captura las tendencias correctamente aunque el modelo Linear Pressure Strain proporciona resultados aceptables. El modelo $v2f$ sobreestima la IRZ.

Por último es interesante resaltar que los modelos avanzados como DES o LES no proporcionan una precisión adecuada debido al carácter transitorio. En la zona de máxima y mínima velocidad se desarrollan torbellinos que los modelos RANS no predicen. Para una comparativa adecuada de modelos LES es necesario un promediado temporal.

Una vez más el $k-\epsilon$ RNG se muestra razonablemente acorde con los datos experimentales. Se aprecia que los modelos $k-\epsilon$ y Spalart-Allmaras producen en general resultados aceptables mientras que los modelos $k-\omega$ no ajustan correctamente.

A pesar del coste computacional, modelos de turbulencia de más de 2 ecuaciones no evidencian un aumento de su precisión.

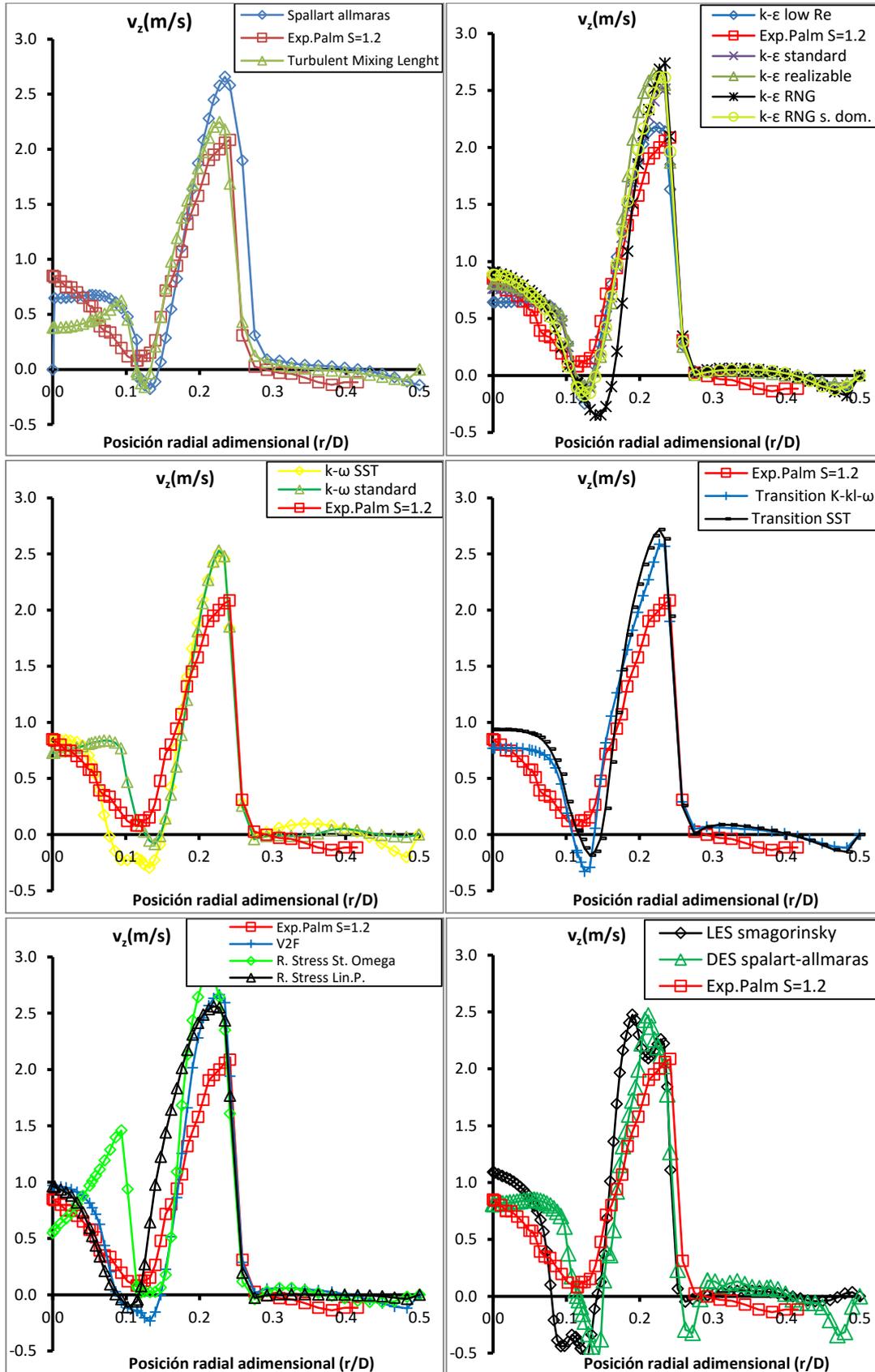


Figura 3-25 Perfil de velocidad axial (m/s) en función de la posición radial adimensional en $z=0.01D$ para varios modelos de turbulencia. Resultados experimentales (Palm et al. 2005), $S=1.2$

Existe una modificación del modelo $k-\epsilon$ RNG para flujos rotantes en el que la viscosidad turbulenta se ajusta mediante un parámetro, α_s , que hace que la simulación del flujo sea mucho más fiel a la realidad. Se ha realizado un estudio en función del parámetro α_s (Figura 3-26) para ver cuál es más adecuado para la simulación del quemador de flujo rotante, concluyendo que el valor que mejor ajusta es 0.001. Los casos analizados son de M29 a M36 y corresponden a valores de parámetro α_s de 5, 0.8, 0.2, 0.04, 0.01, 0.005, 0.001 y 0.00001 respectivamente.

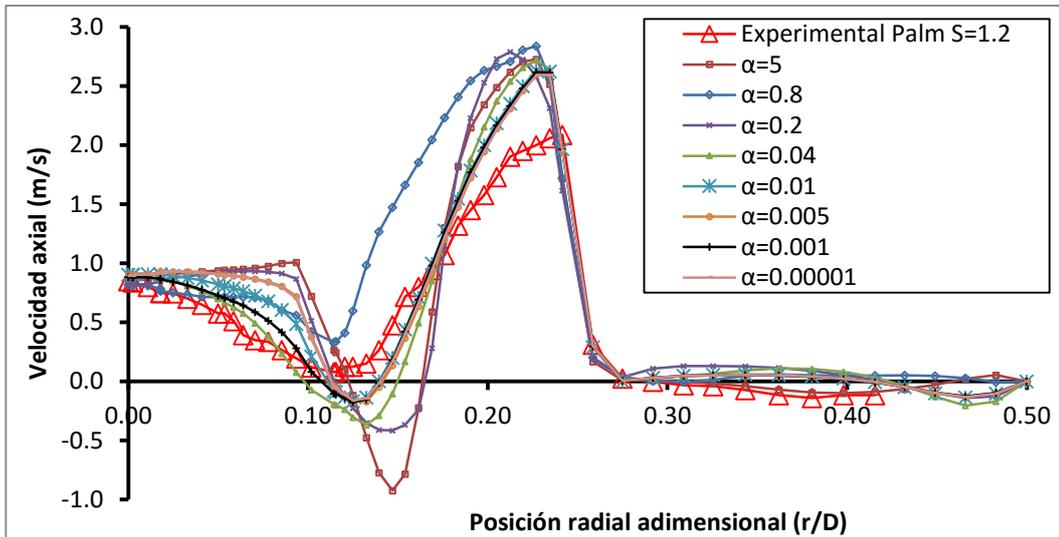


Figura 3-26 Influencia de α_s en el perfil de velocidad del modelo $k-\epsilon$ RNG swirl dominated.

Con el modelo de turbulencia que mejor ajusta a los resultados experimentales de Palm et al. (2005) ($k-\epsilon$ RNG swirl dominated y $\alpha_s = 0.001$) se analiza una simulación con $S=0.45$ para comparar los resultados frente a los obtenidos por Roback et al. (1983). La Figura 3-27 muestra dicha comparativa. Se obtiene que el ajuste de los resultados numéricos con los experimentales de Roback et al. (1983) es significativamente mejor que los de Palm et al. (2005).

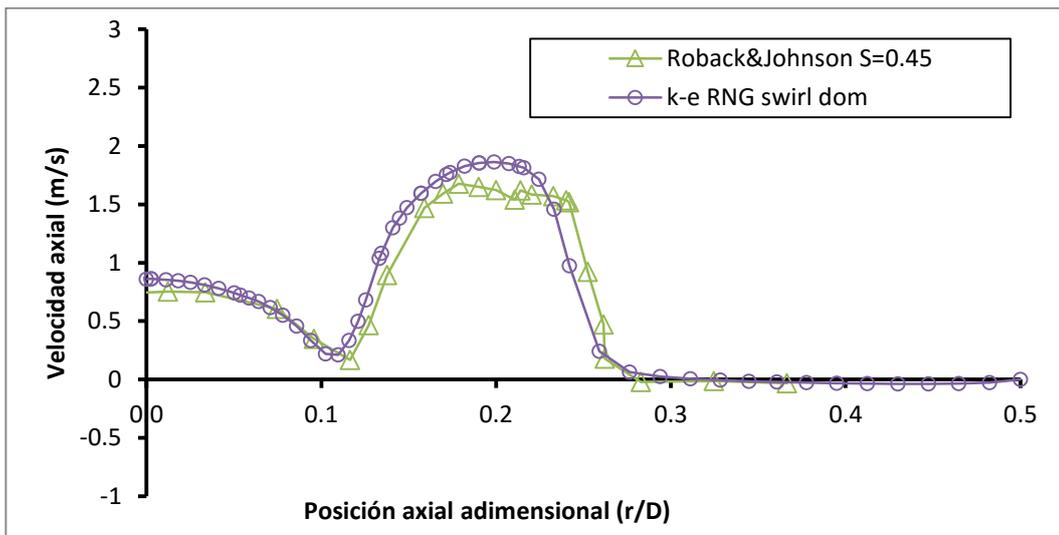


Figura 3-27 Perfil de velocidad axial en función de la posición radial adimensional en $z=0.042D$ para el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ RNG swirl dominated. Resultados experimentales Roback et al (1983), $S=0.45$

3.2.4 Esquema discretización

Se han realizado varias simulaciones para determinar cuál es el esquema de discretización más adecuado para el quemador de flujo rotante. Los esquemas de menor orden proporcionarán una gran estabilidad numérica pero se tendrá difusión numérica que tenderá a suavizar la solución. Los esquemas de mayor orden presentan riesgo de oscilaciones numéricas pero una mejor exactitud a costa también de un mayor coste computacional.

Se analizarán los siguientes esquemas para el transporte convectivo:

- *First Order Upwind* (de Primer Orden) (Caso M37)
- *Second Order Upwind* (de Segundo Orden) (Caso M38)
- *Power Law* (Potencial) (Caso M39)
- QUICK (Caso M40)
- *Third Order MUSCL* (de Tercer Orden) (Caso M41)

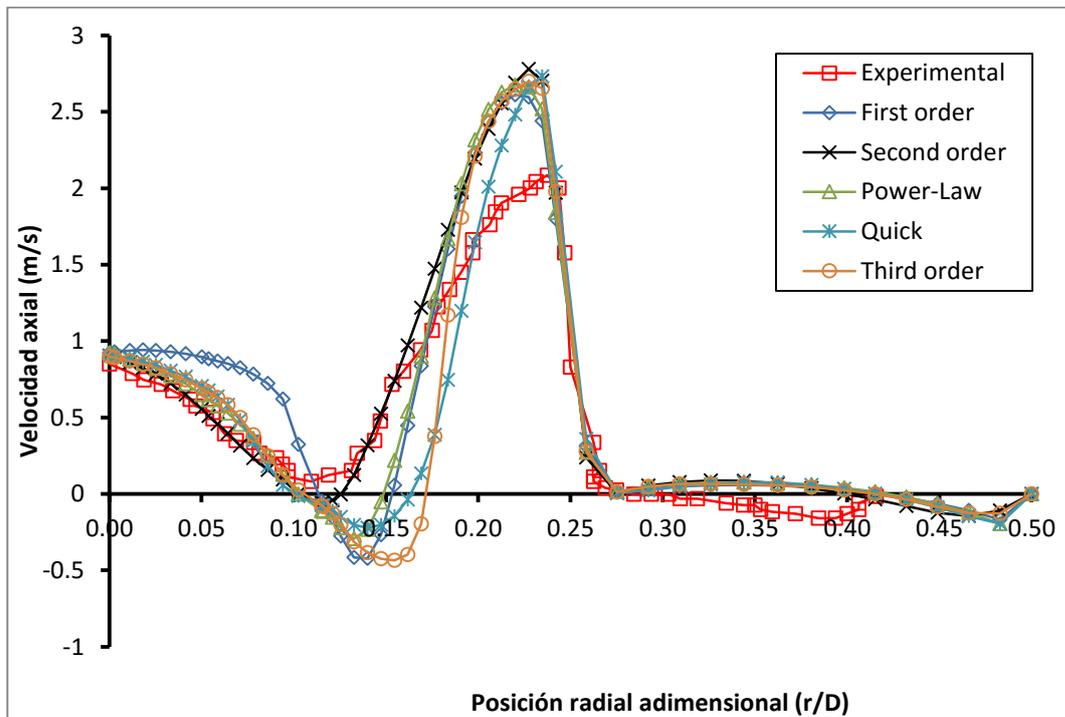


Figura 3-28 Perfil de velocidad axial en función de la posición radial adimensional en $z=0.042D$. Resultados experimentales Roback et al. 1983. $S=0.45$. Esquemas de discretización: First Order Upwind, Second Order Upwind, Power Law, QUICK (Caso M40) y Third Order MUSCL.

La Figura 3-28 muestra el análisis del mejor esquema de discretización para la cantidad de movimiento, k y ϵ concluyendo que el esquema de primer orden está no captura correctamente las tendencias respecto al experimental y que el esquema de segundo orden se ajusta mucho mejor a los resultados experimentales excepto en la zona en que la velocidad es máxima, que la sobreestima. El esquema de discretización usado para la presión ha sido de segundo orden.

Los esquemas de tercer orden, quick y power law estiman una longitud radial de la IRZ significativamente mayor a los resultados experimentales. Además, los valores máximos y mínimos son sobrestimados y subestimados respectivamente.

Se puede concluir que el mejor esquema de discretización es el de segundo orden.

Se realiza un análisis similar para discretización de la presión comparando los esquemas Standard, PRESTO, Linear, Second order y Body Force Weighted obteniendo que el mejor esquema para presión es el de Segundo orden. Los casos analizados son M42, M43, M44, M45 y M46.

En este estudio se ha utilizado una discretización de segundo orden para la cantidad de movimiento, k y ϵ y para el gradiente se ha empleado el método Least squares cell based. La Figura 3-29 muestra dicho análisis.

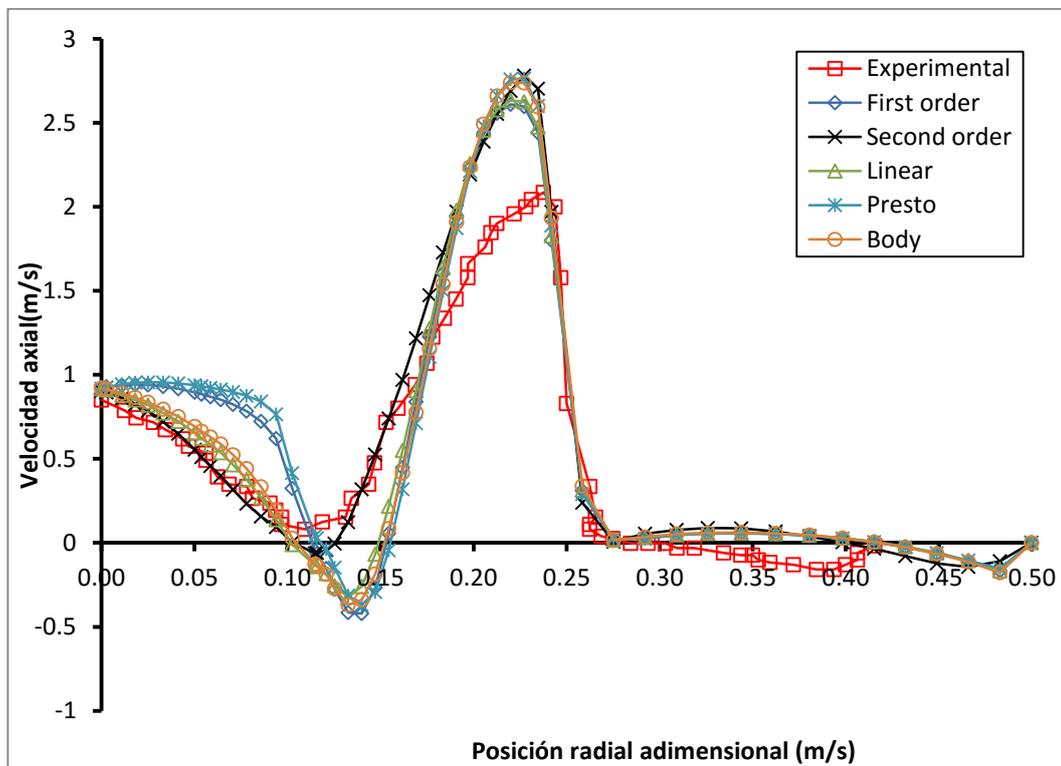


Figura 3-29 Perfil de velocidad axial en función de la posición radial adimensional en $z=0.042D$. Resultados experimentales Roback et al. 1983. $S=0.45$. Esquemas de discretización: Standard, PRESTO, Linear, Second order y Body Force Weighted

3.2.5 Acoplamiento presión-velocidad

Se han realizado simulaciones con los 4 algoritmos de acoplamiento P-V y se ha obtenido que las simulaciones con PISO divergen, debido a que suelen emplearse para casos transitorios, mientras que SIMPLEC y SIMPLE proporcionan resultados muy similares por tanto se utilizará este último debido a que es el de menor coste computacional. Los casos analizados son M47, M48, M49 y M50.

3.2.6 Resumen de los modelos numéricos óptimos

Basándose en los análisis anteriores se resumen las características de modelo óptimo de Ansys Fluent en la Tabla 3-17.

Tabla 3-17 Resumen de las características del modelo numérico

Concepto	Característica
Construcción de geometrías	Ansys Design Modeler
Generación de mallas	Ansys Meshing.
Código CFD	ANSYS Fluent 14.5
Geometrías	3D
Mallado	Hexaédrico. Estructurado 75%
Modelo físico	Fluido incompresible
Condiciones de contorno	Velocidad entrada/Presión salida
Turbulencia	k-ε RNG swirl dominated $\alpha_s=0.001$
Método de resolución	PBS
Discretización Espacial	Segundo orden
Discretización Presión	Segundo orden
Discretización Gradiente	Green-Gauss cell based
Acoplamiento presión-velocidad	Simple
Residuales	$<10^{-4}$

Además del modelo creado con Ansys Fluent se ha empleado el código libre OpenFOAM ya que al ser una plataforma de código abierto en continuo desarrollo es necesario contrastar y validar los modelos frente a varios fenómenos. Se resumen en la Tabla 3-18 las características óptimas del modelo numérico de OpenFOAM.

A pesar de que en flujos rotantes el modelo de turbulencia k-ε standard no proporciona unos resultados óptimos es el más usado en OpenFOAM, por lo que será el que se emplee. La principal diferencia entre los modelos estándar y RNG es la estimación de la longitud los pequeños torbellinos en la escala de Kolmogorov.

Tabla 3-18 Modelo numérico de OpenFOAM

Concepto	Característica
Construcción de geometrías	GAMBIT 2.4.1
Generación de mallas	GAMBIT 2.4.1
Código CFD	OpenFOAM
Geometrías	3D
Mallado	Hexaédrico
Algoritmo	Steady RANS
Multigrid	AMG
Condiciones de contorno	Velocidad entrada/Presión salida
Turbulencia	k-ε standard
Discretización	Segundo orden
Acoplamiento presión-velocidad	Simple
Residuales	$<10^{-4}$

3.3 Validación

Con el objeto de contrastar la bondad de los modelos preparados se comparan los resultados obtenidos frente dos análisis experimentales para distintos números de swirl (Palm et al. 2005 y Roback et al. 1983). En el apartado 2.4.5 se resumen las características experimentales de los casos test de referencia. La Tabla 3-17 y la Tabla 3-18 resumen las características de los modelos numéricos óptimos realizados con los códigos CFD Ansys Fluent y OpenFOAM.

La primera comparativa (Test 1) se realiza contrastando un modelo de Ansys Fluent con modelo de turbulencia k- ϵ RNG swirl dominated, $\alpha_s=0.001$, generador de swirl de aletas curvas para dos condiciones de operación distintas ($S=0.6$ y $S=1.2$), frente a los resultados obtenidos por Palm et al. (2005).

La segunda comparativa (Test 2) consiste en un análisis más detallado que contrasta los resultados experimentales para una condición de operación ($S=0.45$) realizados por Roback et al. (1983) frente modelos realizados en Ansys Fluent con dos generadores de swirl distintos (placas planas y aletas curvas) frente a sus homólogos realizados en OpenFOAM. El objeto del análisis es mostrar diferencias entre generadores de swirl y códigos de simulación.

Las características de los modelos experimentales y numéricos empleados para la validación se resumen en la Tabla 3-19.

Tabla 3-19 Modelos analizados para la validación

	Test 1	Test 2
Condición operación	$S=0.6 / S=1.2$	$S=0.45$
Código CFD	Ansys Fluent	Ansys Fluent / OpenFOAM
Generador de swirl	Aletas curvas	Aletas curvas / Placas planas
Resultados experimentales	Palm	Roback-Johnson
Id. Modelos	M51 y M52	M53, M54, M55 y M56

3.3.1 Test 1. Palm

Se han simulado dos casos con números de swirl análogos a los experimentales ($S=0.6$ y $S=1.2$, casos M51 y M52 respectivamente) y se han comparado los resultados obtenidos para varias secciones axiales. Se han analizado las velocidades axiales para las posiciones axiales 0.01D, 0.2D, 0.4D y 0.8D para $S=0.6$ en la Figura 3-30 y para $S=1.2$ en la (Figura 3-31). En el capítulo 4 se realiza un análisis detallado del flujo.

El ajuste en general es bueno debido a que las tendencias generales del flujo están representadas en las simulaciones CFD. Es importante notar que a medida que la sección se aleja de la entrada de la cámara la reproducción del flujo es más complicada ya que evoluciona hacia diferentes inestabilidades.

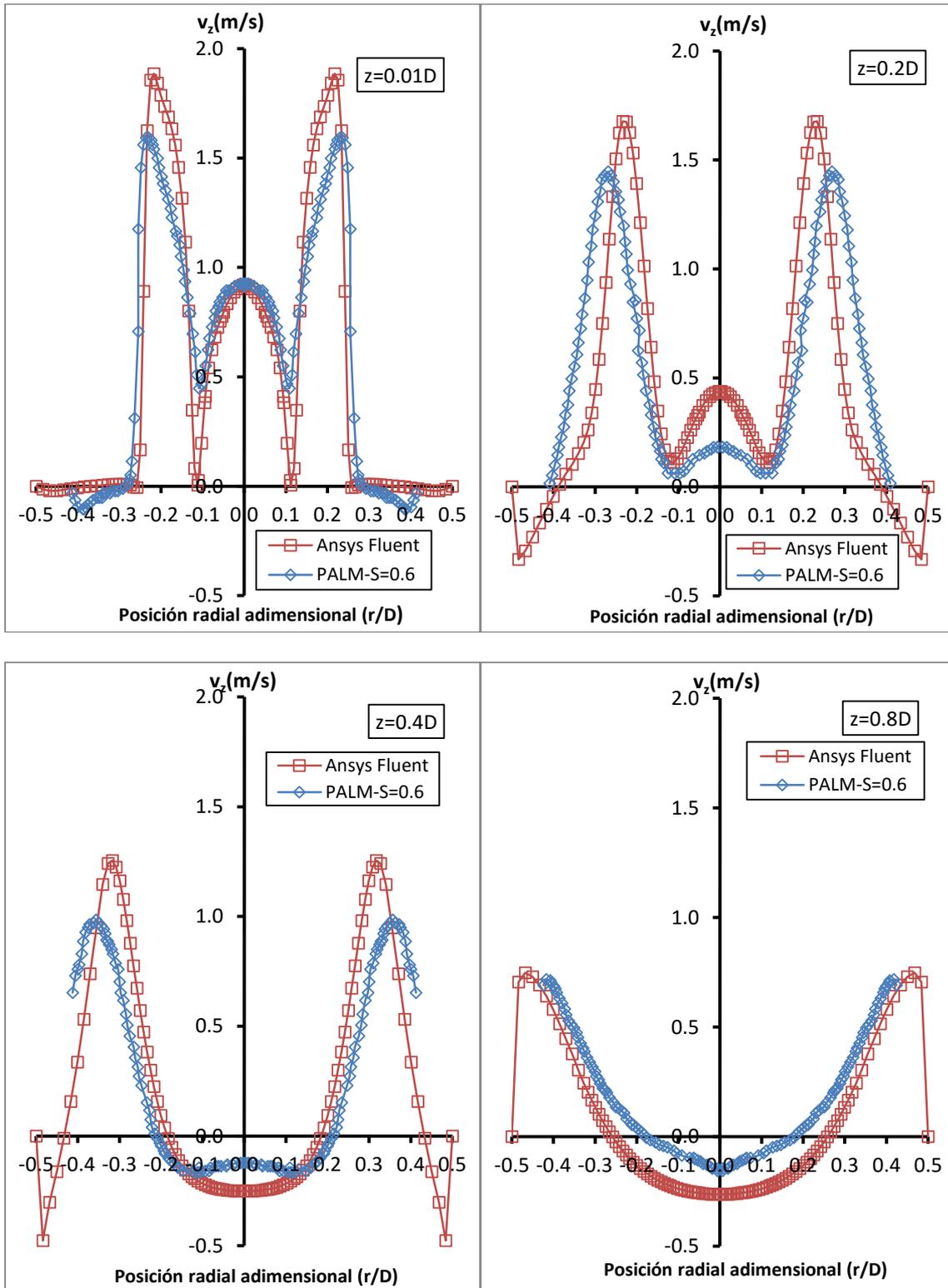


Figura 3-30 Validación experimental Test 1. $S=0.6$ Posiciones axiales 0.01D, 0.2D, 0.4D y 0.8D

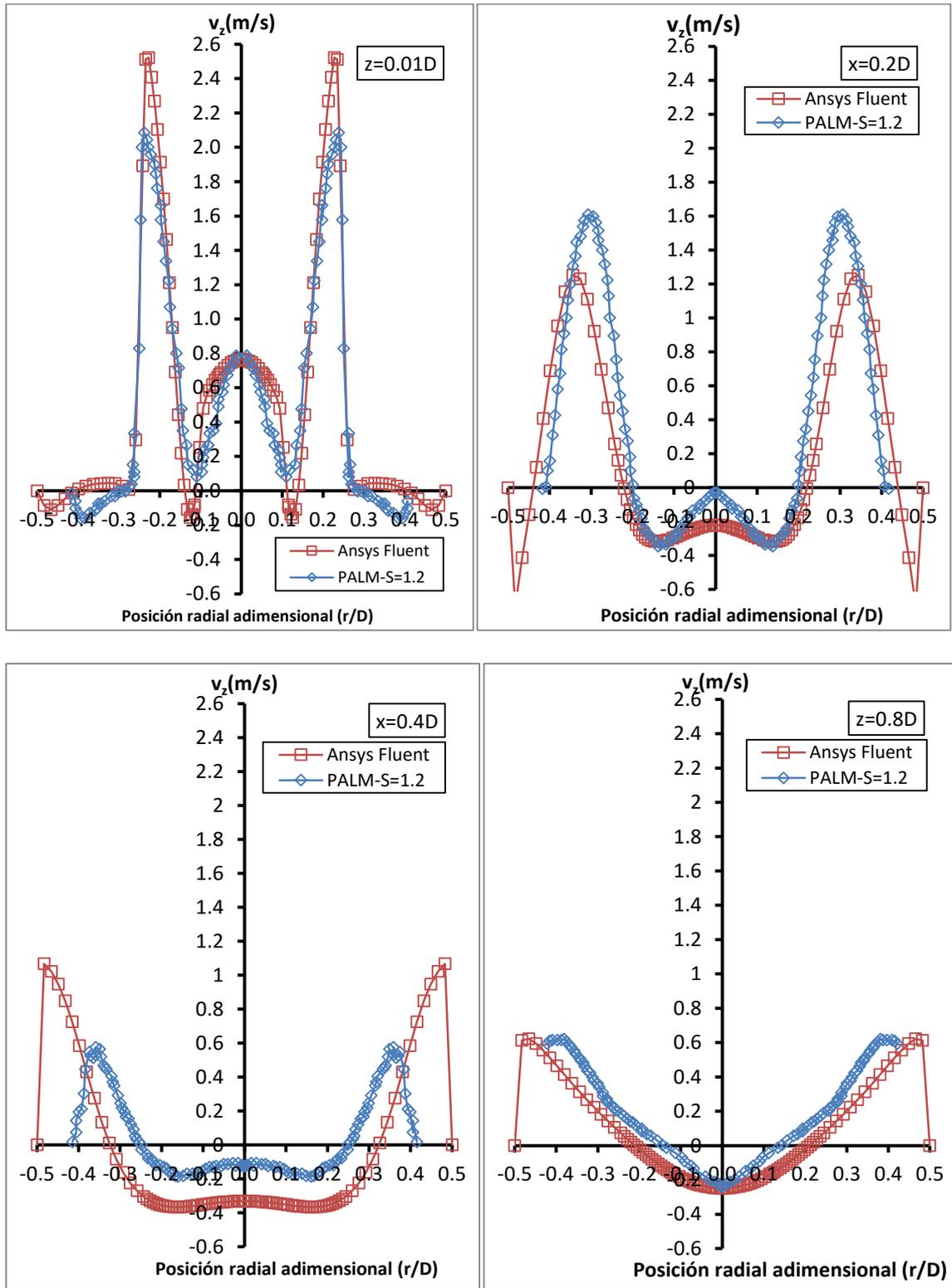


Figura 3-31 Validación experimental Test 1. $S=1.2$ Posiciones axiales 0.01D , 0.2D 0.4D y 0.8D

Si se analiza el error relativo entre los modelos teóricos y experimentales respecto a la velocidad máxima se encuentran diferencias medias de un 16% para número de swirl bajo y de un 32% para número de swirl alto.

En referencia al tamaño de la IRZ se encuentran diferencias medias de un 19% para número de swirl bajo y de un 21% para número de swirl alto.

Se muestran los errores relativos para cada número de swirl y posición axial en la Tabla 3-20 y la Tabla 3-21.

Tabla 3-20 Error relativo de la velocidad máxima. (Caso test 1)

Número de swirl	Error relativo $v_{z, \max}$ (%)			
	0.01D	0.2D	0.4D	0.8D
S=0.6	18	16	27	4
S=1.2	21	22	85	0.3

Tabla 3-21 Error relativo del tamaño radial de la IRZ. (Caso test 1)

Número de swirl	Error relativo L_{IRZ} (%)			
	0.01D	0.2D	0.4D	0.8D
S=0.6	10	5	18	44
S=1.2	1	10	27	47

3.3.2 Test 2. Roback-Johnson

Se comparan los resultados obtenidos con los códigos Ansys Fluent y OpenFOAM con dos generadores de swirl distintos en cada código frente al caso test de Roback et al. (1983) de número de Swirl 0.45.

La Figura 3-32 muestran los perfiles radiales de velocidad axial en diferentes posiciones axiales y en la posición radial adimensional nula. Los triángulos vacíos corresponden a los resultados experimentales de Roback et al. (1983) mientras que los círculos corresponden a los resultados numéricos con generador de swirl de placas planas y los cuadrados corresponden al generador de swirl de aletas curvas. Los símbolos sólidos pertenecen a Ansys Fluent mientras que los vacíos a OpenFOAM.

Los casos analizados son M53 (Aletas Curvas, Ansys Fluent), M54 (Aletas Curvas, OpenFOAM), M55 (Placas planas, Ansys Fluent), y M56 (Placas planas, OpenFOAM).

Las velocidades axiales negativas se asocian con el flujo reverso de la IRZ. En la sección $z=0.42$, los modelos de placas planas tienden a capturar la variación de curvatura en la zona cerca del eje. En la mayor parte de los casos, para la sección $z=0.42D$ se predice una IRZ más amplia que los valores experimentales en cambio en la sección mayores la IRZ es más estrecha que la sección experimental. Este rápido cambio de tendencia podría ser causado porque los modelos se comporten de una manera disipativa. En la figura Xnd indica la posición axial adimensional (z/D).

Si se analiza la velocidad axial en función de la posición axial adimensionalizada con el diámetro de la cámara para el radio nulo (Figura 3-32), se observa que el tamaño longitudinal de la IRZ se predice con un acuerdo razonable. La velocidad es negativa en el IRZ y converge asintóticamente hacia el extremo de la cámara. Teniendo en

cuenta que el tamaño longitudinal de la IRZ está limitado por dos puntos de remanso en el eje longitudinal, se obtiene que la mayoría de los modelos predicen longitudes similares para la IRZ, siendo en las simulaciones realizadas con Ansys Fluent ligeramente más cortas que las predichas por OpenFOAM. Los resultados indican un ajuste razonable con los datos experimentales de Roback et al. (1983).

Si se analiza el error relativo entre los modelos teóricos y experimentales respecto a la velocidad máxima se encuentran diferencias medias de un 18% y de un 16% para modelos con Ansys Fluent y Aletas curvas y placas planas respectivamente.

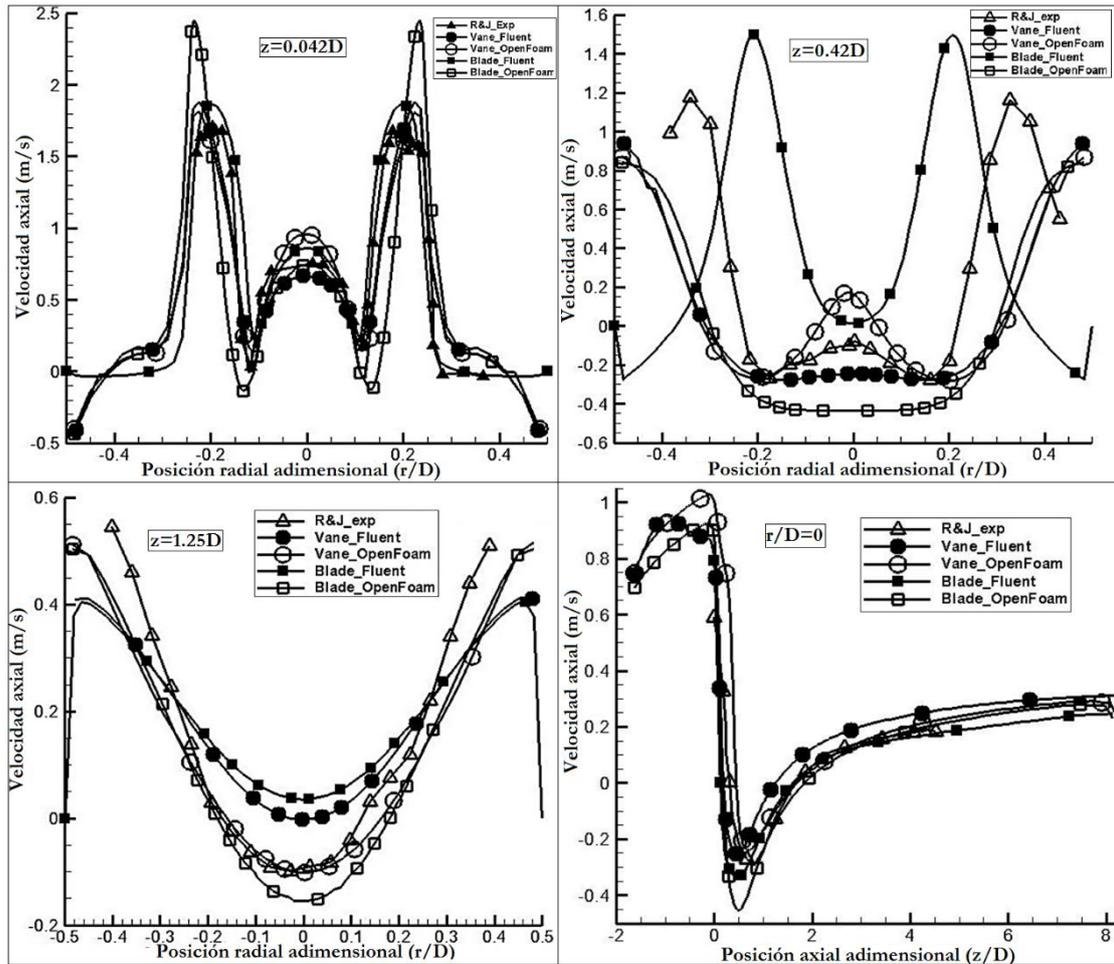


Figura 3-32 Validación experimental Test 2. Velocidad axial en las posiciones axiales 0.042D, 0.42D y 1.25D y en la posición radial $r/D=0$

Los casos analizados con OpenFOAM con aletas curvas y placas planas producen un error medio de un 25% y un 12% respectivamente.

Se muestran los errores relativos de la velocidad máxima y la longitud del generador de swirl para cada código y generador de swirl y posición axial en la Tabla 3-22 y la Tabla 3-23.

Tabla 3-22 Error relativo de la velocidad máxima. (Caso test 2)

Número de swirl	Generador de swirl	Código CFD	Error relativo $v_{z, \text{máx.}}$ (%)		
			0.042D	0.42D	1.25D
S=0.45	Aletas Curvas	Ansys Fluent	3	25	25
S=0.45	Placas planas	Ansys Fluent	3	21	24
S=0.45	Aletas Curvas	OpenFOAM	44	25	7
S=0.45	Placas planas	OpenFOAM	3	29	5

Tabla 3-23 Error relativo de la longitud axial de la IRZ. (Caso test 2)

Número de swirl	Generador de swirl	Código CFD	Error relativo L_{IRZ} (%)
S=0.45	Aletas Curvas	Ansys Fluent	6
S=0.45	Placas planas	Ansys Fluent	25
S=0.45	Aletas Curvas	OpenFOAM	6
S=0.45	Placas planas	OpenFOAM	19

La validación de los resultados experimentales de Roback et al. (1983) produce errores medios de velocidad máxima entre un 12 y un 25% en función del código CFD y el generador de swirl empleados. Si se analiza la longitud axial de la IRZ se tienen errores relativos de un 6 a un 25%.

Los códigos proporcionan estimaciones similares para la longitud axial de la IRZ mientras que se observan diferencias significativas entre generadores de swirl. Esto muestra que el ajuste entre códigos CFD es razonable y que las diferencias entre resultados se pueden deber al flujo que proporcionan generadores de swirl distintos. Los modelos numéricos se ajustan mejor a los de Roback et al. (1983) que a los de Palm et al. (2005).

3.4 Conclusiones

Este capítulo trata sobre la modelización isoterma de un quemador de flujo rotante.

Previamente se describen los fundamentos teóricos del análisis CFD que se pretende realizar. Para ello se muestran con detalle las ecuaciones a resolver, las técnicas de tratamiento de la turbulencia, así como los métodos numéricos aplicables.

Después, se describen la geometría, el mallado, las condiciones de contorno y de operación del quemador de flujo rotante objeto de la simulación.

Una vez descrito el modelo numérico se optimiza éste. Es importante notar la complejidad numérica relacionada con el diseño de experimentos, simulación y postprocesado de modelos, ya que han sido necesarios hasta 56 casos para determinar dicho modelo óptimo.

Se determinan el tamaño de malla, modelo turbulencia, algoritmo de discretización y acoplamiento presión velocidad óptimos.

Para establecer el tamaño de malla óptimo, se han construido 5 mallas distintas con hasta 7.5 millones de celdas, concluyéndose que el tamaño óptimo es de 1.66

millones de celdas en base al número de swirl, tamaño de la zona de recirculación interior (IRZ) y al perfil de velocidades. El error de discretización calculado según la extrapolación de Richardson para la malla óptima es menor al 1%.

Para determinar las mejores características del modelo numérico se comparan los resultados numéricos frente a los experimentales de Roback et al. (1983) y Palm et al. (2005).

El análisis del modelo de turbulencia óptimo se ha realizado con dos enfoques distintos.

El primero asumiendo guiado perfecto, con un generador de swirl ideal y el segundo con un generador de swirl 3D de aletas curvas.

Las conclusiones son similares en ambos análisis indicando que el mejor modelo de turbulencia de los 16 analizados es el k- ϵ RNG swirl dominated. Dicho modelo es especial para flujos rotantes ya que dispone de un parámetro (α_s) que ajusta la viscosidad turbulenta. Un análisis paramétrico ha determinado que $\alpha_s = 0.001$ es el valor que mejor ajusta. La comparativa de modelos transitorios como LES no proporciona resultados aceptables, ya que los valores instantáneos son significativamente diferentes a los medios. En el capítulo 5 se realizará un postproceso adecuado que permita la comparación de perfiles.

Para la obtención del esquema de discretización óptimo se han simulado 10 casos distintos, concluyendo que tanto para la presión como para la cantidad de movimiento, k y ϵ el mejor esquema es el de segundo orden.

Un modelo parametrizado en el entorno Workbench ha sido preparado para realizar posteriormente un diseño cuidado del generador de swirl y del difusor de la cámara de combustión.

A pesar de la compleja discretización de las aletas del generador de swirl, dos dispositivos diferentes se han analizado numéricamente; un generador de swirl con placas planas y un generador de swirl de aletas curvas, que disminuye las pérdidas por choque. Ambos dispositivos se han modelado con bloques de mallas estructuradas y se han simulados con dos códigos CFD distintos, Ansys-Fluent y OpenFOAM.

La evaluación del número de swirl es compleja y variable, lo que dificulta notablemente la validación experimental. Se han comparado tres correlaciones distintas para la evaluación del número de swirl. El ajuste entre correlaciones para generadores de swirl de aletas curvas es aceptable para bajos números de swirl, mientras que para altos existen diferencias significativas. El número de swirl estimado para generadores de rotación de placas planas es similar en las tres correlaciones analizadas, existiendo diferencias de un 15 a un 30% para la correlación de Sheen et al. (1996), mientras que la correlación de Oystein (2004) se encuentran diferencias menores al 1% para números de swirl medios y altos. Se comparó el número de swirl de un generador de rotación experimental simulado en Durox et al. (2013) con las correlaciones anteriores y otras dos adicionales. Se confirma la gran variabilidad en la estimación del número de swirl.

Se validó el modelo numérico mediante la comparativa de éste frente a dos resultados experimentales distintos. En ambos trabajos, referenciados en la literatura, se realizaron mediciones láser para obtener la velocidad. En los experimentos de Palm et al. (2005) se analizan los casos de número de swirl 0.6 y 1.2 mientras que en los de Roback et al. (1983), realizados para la NASA, se analiza únicamente el caso $S=0.45$. Es importante resaltar que en estos últimos experimentos se midieron las tres componentes de la velocidad en numerosas secciones axiales.

De forma general las predicciones del modelo numérico se ajustan a las experimentales. Las tendencias generales del flujo están capturadas correctamente en las simulaciones CFD. La reproducción del flujo es más sencilla para posiciones axiales pequeñas, es decir, cerca de la entrada de la cámara de ensayo, donde el flujo viene más condicionado por las condiciones de contorno, la generación de la capa límite y la mezcla de los chorros aun es incipiente.

La validación de los resultados numéricos frente a los experimentales de Palm et al. (2005) se realizó para número de swirl 0.6 y 1.2 con el código CFD Ansys Fluent y un generador de swirl de aletas curvas. Se obtienen errores medios entre un 16% y un 32% para la velocidad máxima, mientras que si se analiza el tamaño radial de la IRZ se obtienen errores de entre un 19% y un 21%.

Asimismo la validación de los resultados numéricos frente a los experimentales de Roback et al. 1983 muestra menores errores que los obtenidos en la validación Palm et al. (2005). Se encuentran diferencias medias de velocidad máxima de un 12% a un 25%, mientras que si se analiza la longitud axial de la IRZ se tienen errores relativos de un 6% a un 25%.

Los códigos proporcionan estimaciones similares para la longitud axial de la IRZ, mientras que se observan diferencias significativas entre generadores de swirl. Esto muestra que el ajuste entre códigos CFD es razonable y que las diferencias entre resultados se pueden deber al flujo que proporcionan generadores de swirl distintos.

Las diferencias también pueden ser achacables a la estimación del número de swirl efectivo de los casos experimentales y numéricos. Se ha concluido anteriormente que su evaluación es compleja y existe numerosa variabilidad entre correlaciones.

Es importante notar que existen mecanismos como el PVC o inestabilidades que modifican la compleja estructura del flujo. Éstos no pueden ser capturados por el tratamiento estacionario con modelos RANS. Un análisis transitorio con modelos de turbulencia avanzados como los modelos LES mejorará la validación de los resultados como se verá en un capítulo 5.

Se puede concluir de forma general que esta tesis, la primera dentro de la línea de investigación en quemadores de flujo rotante del grupo de mecánica de fluidos de la Universidad de Valladolid, ha conseguido establecer las bases y la metodología en el modelado numérico mediante RANS de la interacción de dos chorros coaxiales en un quemador de flujo rotante.

3.5 Referencias

- [83]. Ansys. (2012a). Ansys Fluent Theory Guide; Release 14.5.
- [84]. Ansys. (2012b). Ansys Meshing User's Guide. Release 14.5
- [85]. Ansys. (2012c). Design Modeler User Guide. Release 14.5.
- [86]. Davidson, L. (1997). LES of Recirculating Flow without any Homogeneous Direction: A Dynamic One-Equation Subgrid Model. Davidson, L. (1997). LES of Recirculating Flow without any Homogeneous Direction: A Dynamic One-Equation Subgrid Model. 2nd Int. Symp. on Turbulence Heat and Mass Transfer, pp. 481-490, Delft University Press, Delft.
- [87]. Durbin, P. A. (1995). Separated Flow Computations with the k-epsilon-v2 Model. AIAA Journal. vol. 33, no. 4, p. 659-664, ISSN 0001-1452
- [88]. Durox, D., Moeck J.P., Bourgooin J.F., Morenton, P. Viallon M., Schuller T. and Candel S. (2013). Flame dynamics of a variable swirl number system and instability control. Combustion and Flame vol. 160, no. 9, pp. 1729–1742.
- [89]. Eggenspieler, G. (2012). Turbulence Modeling. Ansys Conference. [accessed Jun 2, 2015].
<http://ainastran.org/staticassets/ANSYS/Conference/Confidence/San%20Jose/Downloads/turbulence-summary-4.pdf>
- [90]. Ferziger, J. H. and Peric, M. (2002). Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg ed., 2002. ISBN 978-3-540-42074-3.
- [91]. Galley, D., Ducruix, S., Lacas, F. Veynante, D. (2011). Mixing and stabilization study of a partially premixed swirling flame using laser induced fluorescence. Combust. Flame vol.158 no.1 pp. 155–171.
- [92]. Gibson, M. M. and Launder B. E. (1978). Ground Effects on Pressure Fluctuations in the Atmospheric Boundary Layer. J. Fluid Mech., vol.86. pp. 491–511.
- [93]. Fröhlich, J., Kuerten, H., Geurts, B.J., Armenio, V. (2015). Direct and Large-Eddy Simulation IX. ERCOFTAC vol. 20. ISBN 978-3-319-14447-4.
- [94]. Launder, B. E.; and Spalding, D. B. (1972) Lectures in Mathematical Models of Turbulence. London; New York: Academic Press, ISBN 0124380506 9780124380509.
- [95]. Launder B. E. (1989), Second-Moment Closure: Present... and Future?. Inter. J. Heat Fluid Flow., vol. 10 no.4 pp. 282–300.
- [96]. Launder, B.E., Reece, G. J and Rodi, W. (1975). Progress in the Development of a Reynolds-Stress Turbulence Closure. J. Fluid Mech., vol. 68 no. 3 537–566.

- [97]. Menter, F. (2015). Best Practice: Scale-Resolving Simulations in ANSYS CFD-Application Brief Version 2.0. [accessed Jun 2, 2016].
<http://resource.ansys.com/Resource%20Library/Technical%20Briefs/Best+Practice+-+Scale-Resolving+Simulations+in+ANSYS+CFD+-+Application+Brief+Version+2.0>
- [98]. Menter, F., Cooper, J., Chudiak, M., Eggenspieler, G. (2010). Advanced Unsteady Turbulence Models in ANSYS CFD. Ansys Customer Portal.
- [99]. Menter, F., Langtry, L., Suzen, H. and Volker. (2004). A Correlation-Based Transition Model Using Local Variables: Part I-Model Formulation. ASME, Paper No. GT2004-53452, pp. 57-67.
- [100]. Orszag, S. A., Yakhot, V., Flannery, W. S., Boysan, F., Choudhury, D., Maruzewski, J., and Patel, B. (1993). Renormalization Group Modeling and Turbulence Simulations. International Conference on Near-Wall Turbulent Flows, Tempe, Arizona, pp.1031-1046.
- [101]. Palm, R., Grundmann, S., Jakirlic, S., and Tropea, C. (2005). Experimental investigations and modelling of flow and turbulence in a swirl combustor. Proc. of 4th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Williamsburg, VA, USA.
- [102]. Pereiras, B. (2008). Optimización de una turbina de impulso radial para el aprovechamiento de la energía del oleaje. PhD Thesis. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Valladolid.
- [103]. Parneix, S., Durbin, P. A. and Behnia, M. (1998). Computation of a 3D Turbulent Boundary Layer Using the V2F Model. Flow Turbulence and Combustion. vol. 10., pp.19-46.
- [104]. Pope, S. B. (2000) Turbulent Flows. Cambridge University Press, ISBN 9780521598866.
- [105]. Roache, P. J. (1994). Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. Journal of Fluids Engineering, September 1, vol. 116, no. 3, pp. 405-413.
- [106]. Roback, R. and Johnson, B.V. (1983). Mass and Momentum Turbulent Transport Experiments with Confined Swirling Coaxial Jets. NASA Technical Reports NASA-CR-168252.
- [107]. Shih, T.H., Liou, W. W. Shabbir, A. Yang, Z. and Zhu, J. (1995) A New - Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows - Model Development and Validation. Computers Fluids, vol. 24 no.3 pp.227–238.
- [108]. Spalart, P. and Allmaras, S. A. (1994). A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. Recherche Aerospaciale, no. 1, pp. 5-21.

- [109]. Versteeg, H. K., and Malalasekera, W. (1995). An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method. Longman Scientific & Technical, ISBN 0-582-21884-5.
- [110]. Walters D. K., Cokljat, D. (2008). A three-equation eddy-viscosity model for Reynolds-Averaged Navier-Stokes simulations of transitional flows. ASME, Journal of Fluids Engineering, vol. 130 no. 12 pp 121401-14.
- [111]. Wilcox, D. C., (1993), Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, Inc. La Cañada, CA: ISBN 0-9636051-0-0.
- [112]. Yakhot, V.; and Orszag, S.A. (1986). Renormalization Group Analysis of Turbulence. I. Basic Theory. Journal of Scientific Computing, vol. 1, no. 1, pp. 3-51.

CAPÍTULO 4

ANÁLISIS PARAMÉTRICO Y ESTUDIO DEL FLUJO

4	ANÁLISIS PARAMÉTRICO Y ESTUDIO DEL FLUJO	119
4.1	CASOS ANALIZADOS	119
4.2	ANÁLISIS PARAMÉTRICO DE LA GEOMETRÍA.....	120
4.2.1	Generador de swirl	120
4.2.2	Entrada de aire	126
4.2.3	Tamaño de la cámara	127
4.3	ESTUDIO DEL FLUJO	128
4.3.1	Estructura aerodinámica	128
4.3.2	Dimensionamiento de la zona de recirculación interior	130
4.4	INFLUENCIA DEL NÚMERO DE SWIRL.....	132
4.5	ANÁLISIS DE MEZCLADO.....	134
4.6	CONCLUSIONES	141
4.7	REFERENCIAS	143

4 ANÁLISIS PARAMÉTRICO Y ESTUDIO DEL FLUJO

Una vez se ha desarrollado un modelo suficientemente validado y robusto se presentan en este capítulo los resultados del estudio del flujo y del análisis paramétrico de un quemador de flujo rotante.

Dos generadores de swirl son simulados utilizando dos enfoques, uno basado en el uso de un código de propósito general comercial (Ansys Fluent) y otro utilizando un código libre (OpenFOAM).

Se diseña un generador de swirl innovador (aletas curvas) y se compara su eficiencia con uno de placas planas. Para el diseño del primero se estudian el ángulo de salida de las aletas, la longitud y número de éstas. Posteriormente se analiza el efecto de disponer de entradas radiales de aire y el tamaño de la cámara de ensayo. El último análisis de la influencia de la geometría corresponde al estudio del efecto que produce en el flujo el uso de un difusor cónico en la entrada de la cámara de ensayo.

El análisis de cada generador de rotación implica estudiar no sólo el número de swirl, sino también el tamaño de las zonas de recirculación en la cámara de ensayo por lo que se ha descrito el comportamiento aerodinámico en este tipo de quemadores y se ha cuantificado el tamaño de las recirculaciones para generadores de swirl de aletas curvas y placas planas con OpenFOAM y Fluent.

Se llevó a cabo un análisis sobre los patrones de flujo se llevó a cabo para establecer la capacidad de mezclado. Primero desde el punto de vista de la macromezcla obteniendo el tiempo de residencia y posteriormente analizando la micromezcla y en concreto la intensidad de la segregación, que proporciona información sobre la calidad de la mezcla en la región de cortadura entre las zonas de recirculación.

4.1 Casos analizados

Puesto que se han analizado numerosas configuraciones geométricas, se indican en la Tabla 4-1 los modelos geométricos y numéricos simulados en este capítulo. Se indica una identificación de la geometría del modelo, el código CFD empleado para la resolución, el generador de swirl empleado, el ángulo de salida de las aletas, la longitud y número de éstas, el semiángulo de apertura del difusor, la longitud de la cámara de ensayo y el tipo de entrada a la tobera exterior.

Las mallas no son idénticas pero tienen del orden de 1.8 y 2 millones, ya que los generadores de swirl son distintos.

Tabla 4-1 Modelos geométricos simulados

Id. Mod. Geom.	Código CFD	Gen. swirl	Ang. salida (°)	Long. aleta (mm)	Núm. aletas	Ang. difusor (°)	Longitud cámara (mm)	Tipo de Entrada
G1	A. Fluent	Planas	24	50	8	0	1016	anular
G2	A. Fluent	Planas	42	50	8	0	1016	anular
G3	A. Fluent	Planas	62	25	8	0	1016	anular
G4	A. Fluent	Curva	57	41	4	0	1016	anular
G5	A. Fluent	Curva	57	41	12	0	1016	anular
G6	A. Fluent	Curva	57	41	8	0	1016	anular
G7	A. Fluent	Curva	57	29	8	0	1016	anular
G8	A. Fluent	Curva	57	16	8	0	1016	anular
G9	A. Fluent	Curva	29	16	8	0	1016	anular
G10	A. Fluent	Curva	38	16	8	0	1016	anular
G11	A. Fluent	Curva	45	16	8	0	1016	anular
G12	A. Fluent	Curva	62	16	8	0	1016	anular
G13	A. Fluent	Curva	72	16	8	0	1016	anular
G14	A. Fluent	Curva	72	16	8	30	1016	anular
G15	A. Fluent	Curva	72	16	8	45	1016	anular
G16	A. Fluent	Curva	72	16	8	60	1016	anular
G17	A. Fluent	Curva	72	16	8	75	1016	anular
G27	A. Fluent	Curva	72	16	8	90	1016	anular
G28	A. Fluent	Curva	57	41	8	0	406	anular
G29	A. Fluent	Curva	57	41	8	0	610	anular
G30	A. Fluent	Curva	57	41	8	0	812	anular
G31	A. Fluent	Curva	57	41	8	0	1016	radial
G32	OpenFOAM	Curvo	72	16	8	0	1016	anular
G33	OpenFOAM	Plano	62	25	8	0	1016	anular

4.2 Análisis paramétrico de la geometría

Esta sección está dedicada al diseño geométrico del generador de swirl. Además, se analiza el efecto que produce en el flujo la disposición entradas radiales o cámara de ensayo de menor longitud mediante técnicas RANS. Todos los análisis de esta sección se han realizado con Ansys Fluent ya que se ha construido un modelo parametrizado en el entorno Workbench con las dimensiones más importantes mediante los módulos de Ansys Design Modeler y Ansys Meshing con el objeto de poder realizar un diseño cuidado del generador de swirl.

4.2.1 Generador de swirl

Se ha analizado la influencia en el flujo de dos generadores de swirl distintos, de placas planas y de aletas curvas mediante técnicas RANS (Figura 4-1). En el apartado 3.1.4.1 se detalla más información sobre la geometría de los generadores de swirl.

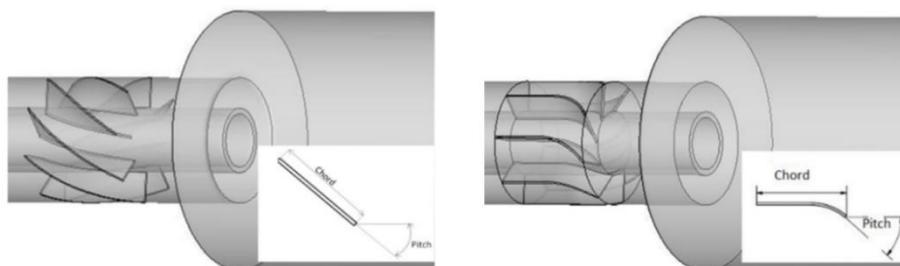


Figura 4-1 Generador de swirl de placas planas (izq.) y aletas curvas (dcha.)

4.2.1.1 Generador de swirl con aletas curvas

Consiste de una parte recta de 25 mm alineada con el eje axial y una parte curva que corresponde a una porción de circunferencia de 24 mm de radio de curvatura. Se han generado varios modelos en función del ángulo de salida (29° , 38° , 45° , 57° , 62° y 72°), la longitud de aleta (16, 29, 41 mm) y el número de aletas (4, 8 y 12) y se ha estudiado su influencia en los resultados. Están basadas en alabes guía de una turbina de impulso radial (Pereiras, 2008).

- Ángulo de salida de las aletas

Es el parámetro más importante ya que mediante éste se pueden obtener distintos números de swirl y por consiguiente distintos tamaños de las recirculaciones y características del flujo.

El análisis de 6 ángulos de salida distintos (Casos G8, G9, G10, G11, G12, G13) pone de manifiesto (Figura 4-2) que existe una relación clara entre el ángulo de salida de las aletas y el número de swirl. Los casos simulados han empleado 8 aletas e incluyen la parte recta de la directriz.

Además es interesante notar que con el rango de ángulos de salida simulados (27° - 72°) se consigue una amplia gama de números de swirl tanto superiores como inferiores al swirl crítico (a partir del cual aparece la IRZ).

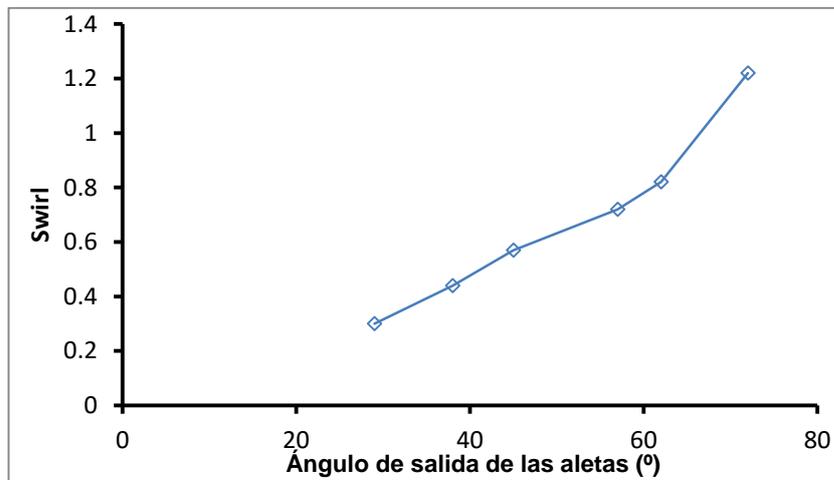


Figura 4-2 Influencia del número de swirl en función del ángulo de salida de las aletas

Si se representa la velocidad axial en función de la coordenada axial se obtienen las gráficas que indican el tamaño axial de la recirculación interior o IRZ (Figura 4-3 y Figura 4-4).

La Figura 4-3 muestra como para $S=0.3$ y ángulo de salida 27° no existe IRZ. Si se aumenta el ángulo de salida de la aleta hasta 37° se obtiene un Swirl de 0.47 con una pequeña recirculación interior limitada por dos puntos de remanso entre los que hay flujo reverso. La zona entre estos dos números de swirl es una zona de transición en la que va apareciendo lentamente la recirculación interior (IRZ) en el eje.

Se puede concluir que para número de Swirl menor que 0.3 no existe recirculación interior y que para números de Swirl mayores que 0.47 sí que existe recirculación en el eje. A medida que aumenta el número de swirl se observa como la IRZ se hace cada vez más grande.

Se puede comprobar que existe una correlación entre el tamaño de la recirculación interior y el número de swirl (Figura 4-4).

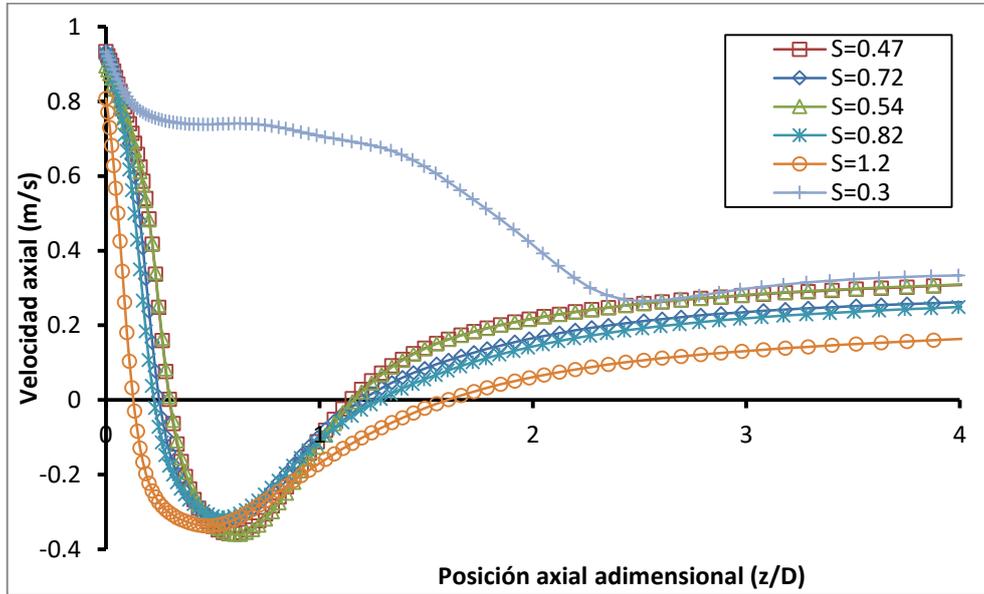


Figura 4-3 Influencia del ángulo de salida del número de swirl en el tamaño de la recirculación

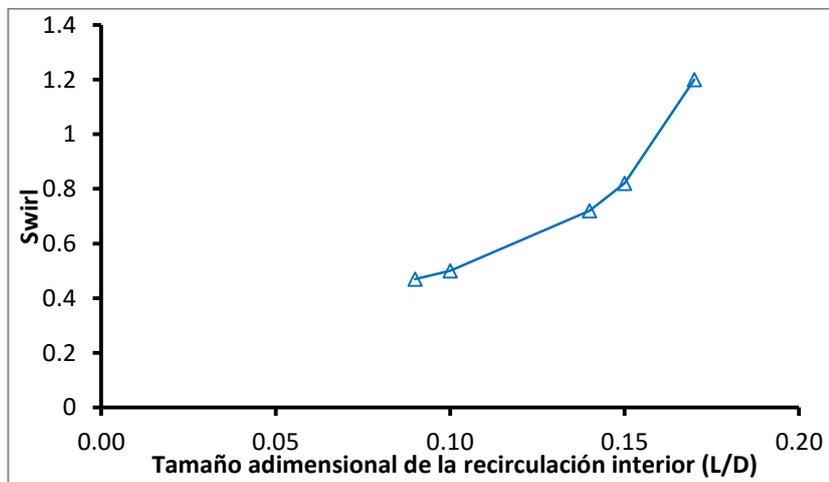


Figura 4-4 Relación entre el tamaño de la recirculación y el número de swirl

- Longitud de la aleta

De forma análoga al análisis anterior se estudia cómo influye la longitud de la aleta en la generación de rotación. El diseño inicial de la aleta se ha realizado basándose en que la parte directriz de ésta ayude a guiar el flujo y hacer que el choque con la aleta sea menor mientras que el ángulo de salida induzca la rotación.

Se han analizado tres casos con longitudes totales de 41, 29 y 16 mm (casos G6, G7 y G8) que corresponden a simulaciones con la parte recta de la aleta completa

Figura 4-5 (izq.), la mitad de dicha parte recta Figura 4-5 (centro.) y por último solo la parte curvada Figura 4-5 (dcha.) respectivamente. Los tres casos han sido simulados con 8 aletas y un ángulo de salida de aletas de 57° .

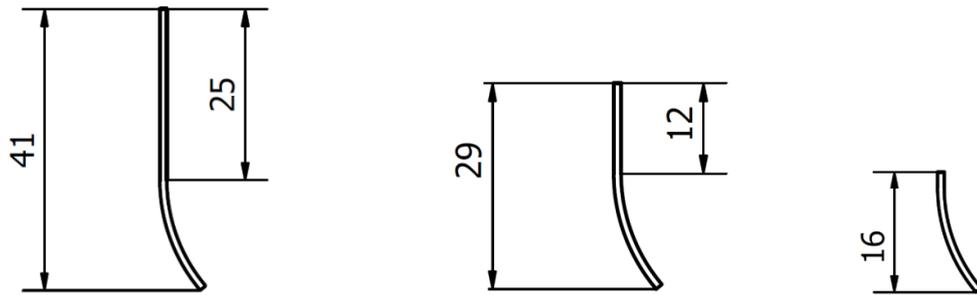


Figura 4-5 Casos simulados para el estudio de la influencia del tamaño de la cuerda.

El análisis de la influencia de la parte directriz en el perfil de velocidad axial en el eje se muestra en la Figura 4-6. Mediante este análisis se puede comprobar si la IRZ cambia de posición y tamaño. Se aprecia que el perfil de velocidad es casi idéntico para los tres casos.

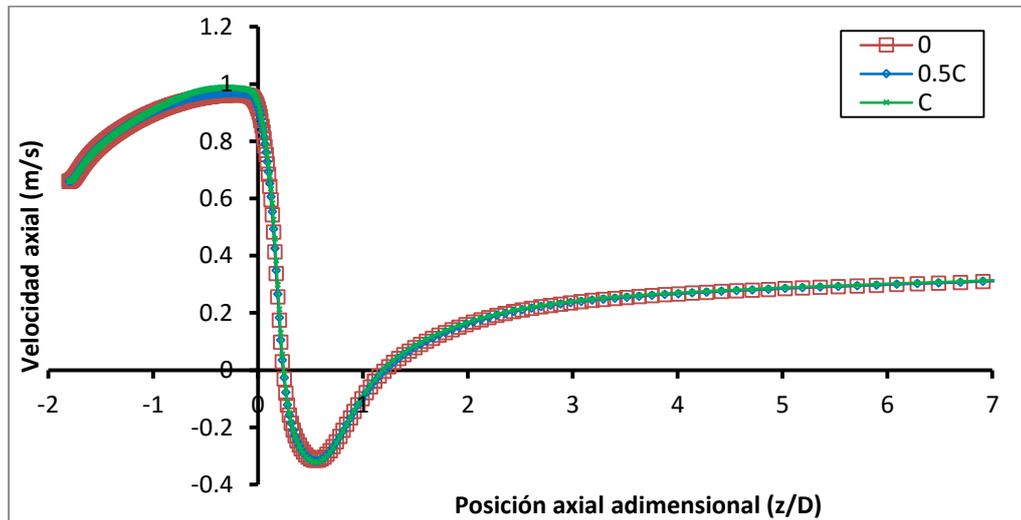


Figura 4-6 Perfiles de velocidad axial en el eje para varias longitudes de aleta. Casos simulados con el 100% (verde), 50% (azul) y 0% (rojo) de la longitud de la parte recta de la aleta.

Se ha evaluado el número de swirl que proporcionan los tres casos y se ha obtenido casi el mismo valor en ellos (Figura 4-7). Se puede concluir que la parte directriz de las aletas no aporta ningún beneficio para el flujo puesto que la parte curva guía bien el flujo y se obtiene el mismo swirl. Se aprecian ligeras diferencias en el flujo en la parte anterior a la cámara ($z < 0$). La posición de las aletas final es $z = -0.4D$.

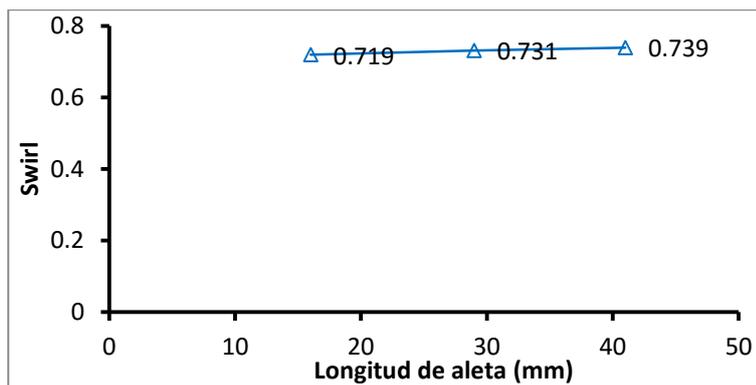


Figura 4-7 Número de swirl para varias longitudes de aleta

- Número de aletas

Por último se han realizado simulaciones para 4, 8 y 12 aletas (casos G4, G5 y G6) obteniendo que el swirl aumenta a medida que lo hace el número de aletas porque el guiado para generar rotación es mejor (Figura 4-8) (Tabla 4-2). Puesto que sería interesante realizar una configuración experimental de este modelo y hay que llegar a una solución de compromiso se selecciona como óptima la configuración de 8 aletas porque situar 12 aletas en una tobera de 60 mm es complejo. Los casos han sido simulados con una longitud de aleta de 16 mm y un ángulo de salida de aletas de 57°.

Tabla 4-2 Número de aletas simuladas

Aletas	Swirl
4	0.513
8	0.755
12	0.876

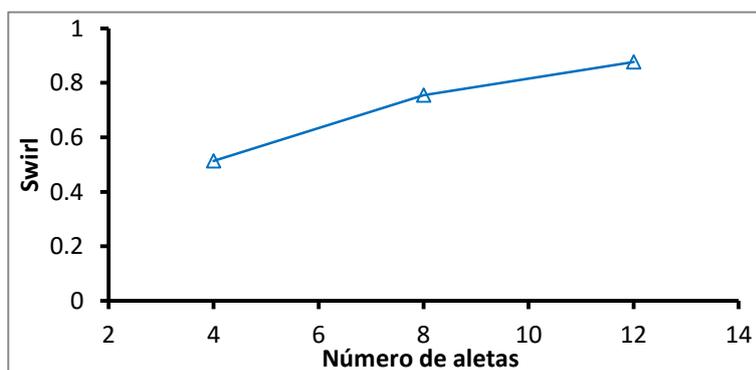


Figura 4-8 Número de swirl en función del número de aletas

4.2.1.2 Generador de swirl de placas planas

Para dotar al chorro anular de la componente tangencial, se ha creado otro generador de swirl que consiste en 8 placas planas de anchura 1 mm y cuerda de 25 mm con ángulo de salida de 24°, 42° y 62°. Los casos analizados son G1, G2 y G3.

4.2.1.3 Comparación entre generadores de swirl de placas planas y aletas curvas.

En el capítulo 3 se realizó una comparativa del número de swirl que resulta de varias correlaciones, en un generador de swirl de placas planas y otro de aletas curvas (Tabla 3-12). Seleccionando únicamente los resultados que proporciona la correlación C1, se obtiene la Figura 4-9 (en el apartado 3.2.1.1 se indicó que el número de swirl se calcula en este trabajo con la correlación C1, salvo que se indique lo contrario). En ella se muestra el número de swirl en función del ángulo de salida de las aletas en un generador de swirl de placas planas y uno de aletas curvas. Se concluye que el generador de swirl de placas planas proporciona un número de swirl más alto que uno de aletas curvas.

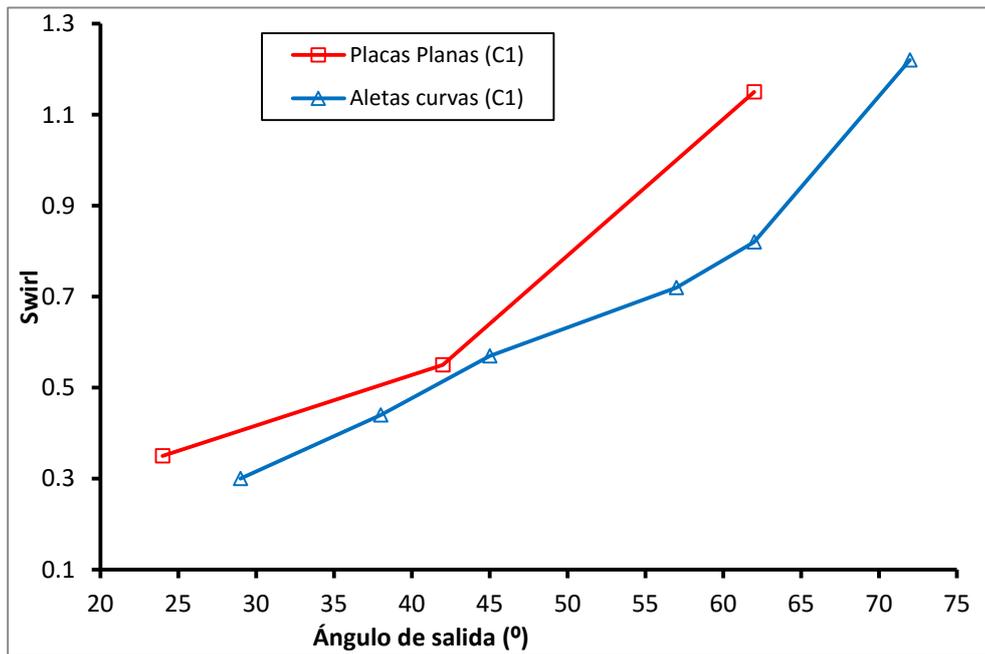


Figura 4-9 Influencia del ángulo de salida de las aletas en el número de swirl para un generador de swirl de placas planas y de placas curvas (correlación C1)

A continuación se evalúa el comportamiento de ambos generadores de swirl. La Figura 4-10 (izq.) muestra la presión en función de la posición axial adimensional en el lado de succión y el lado de presión de las aletas. El generador de swirl de placas planas tiene importantes diferencias de presiones sobre el borde frontal a causa de las pérdidas de choque. El generador de aletas curvas muestra ligeras diferencias de presión en la parte frontal, pero muy importantes en los bordes de salida. Esto podría ser una ventaja para las aletas curvas. Su borde de ataque tiene una parte recta que guía el flujo. El flujo es guiado gradualmente, adquiriendo la componente de la velocidad azimutal hasta el borde de salida.

La Figura 4-10 (dcha.) representa la velocidad tangencial en función de la posición radial adimensional en una línea en la sección de salida de la tobera exterior ($z/D=0$).

Las placas planas se utilizan habitualmente, sin embargo, las aletas curvadas ofrecen menos pérdidas de carga y flujos secundarios más pequeños sin tener una fabricación compleja además de tener mayor equilibrio en dirección radial.

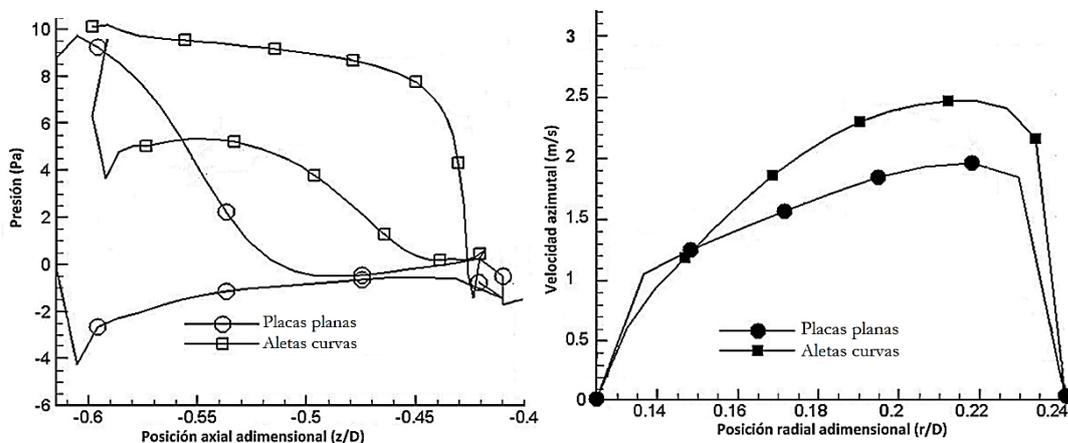


Figura 4-10 Distribución axial de presión en las caras de succión y de presión de una aleta en la mitad de la cuerda (izq.) y distribución radial de la velocidad tangencial aguas abajo del generador de swirl (dcha.).

4.2.2 Entrada de aire

Debido a que se pretende construir una configuración experimental propia, se ha propuesto una geometría equivalente a la propuesta por Roback et al. (1983) pero con mayor facilidad constructiva.

Se ha estudiado si es factible introducir el flujo en la tobera exterior mediante entradas radiales para facilitar una posible configuración experimental.

Se ha analizado la influencia en los resultados de considerar entradas radiales frente a considerar solo una entrada anular mediante técnicas RANS (casos G31 y G6).

Los análisis realizados han evidenciado que la colocación de una sola entrada radial produce falta de uniformidad del flujo en la dirección azimutal. Para ello se implementan dos entradas radiales (Figura 4-11) con las que se consigue que el flujo en la cámara de ensayo sea completamente axil simétrico y equivalente al simulado con una entrada axial.

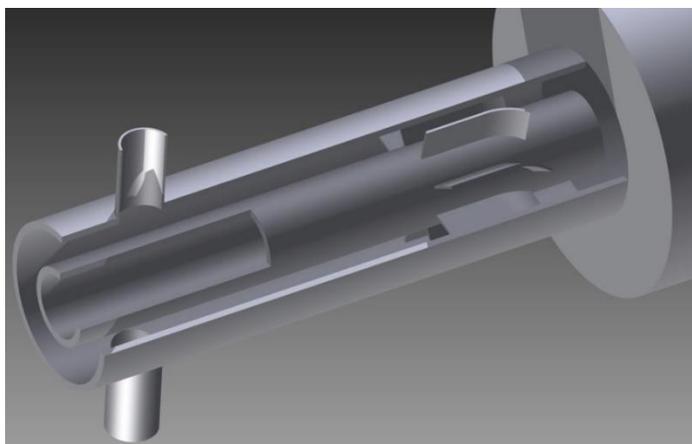


Figura 4-11 Geometría Roback-Johnson modificada. Detalle de las toberas

4.2.3 Tamaño de la cámara

Puesto que las dimensiones de la cámara de ensayo son significativamente mayores, que las del resto de elementos y que la zona de interés se sitúa dentro del 40% de la cámara se ha analizado la influencia de disponer de longitudes menores de la cámara.

Se han simulado casos con el 40, 60, 80 y 100% de la longitud total de la cámara (casos, G29, G30, G28 y G6) obteniendo que los perfiles de velocidad axial en el eje (Figura 4-12) y la posición del centro de las zonas de recirculación (Figura 4-13) son similares en todos los casos, por lo que se podría afirmar que el flujo es independiente de la longitud de la cámara de ensayo a partir de longitudes superiores al el 40% de ésta.

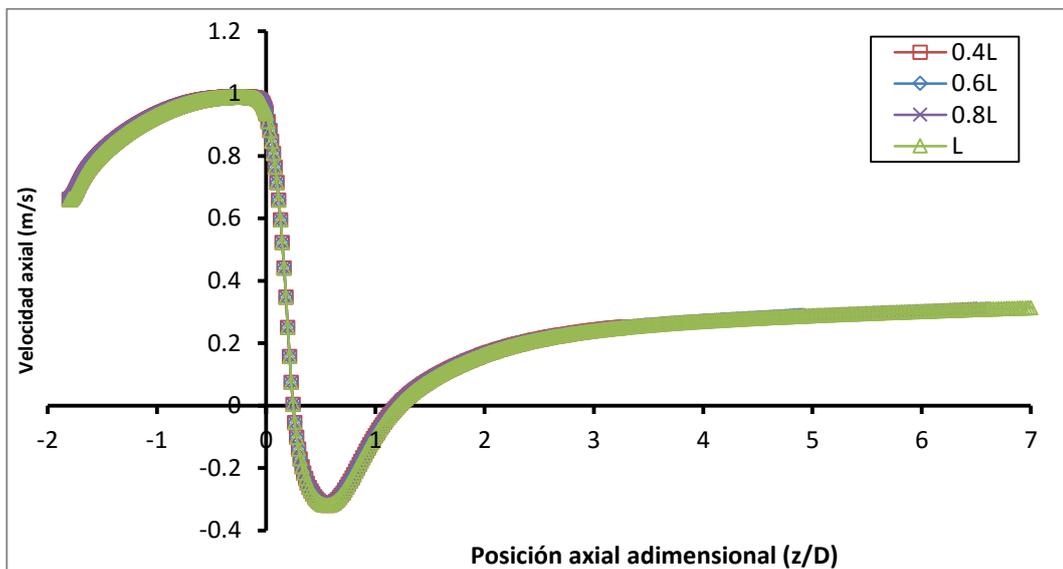


Figura 4-12 Perfil de velocidad axial en el eje para varios tamaños de cámara de ensayo

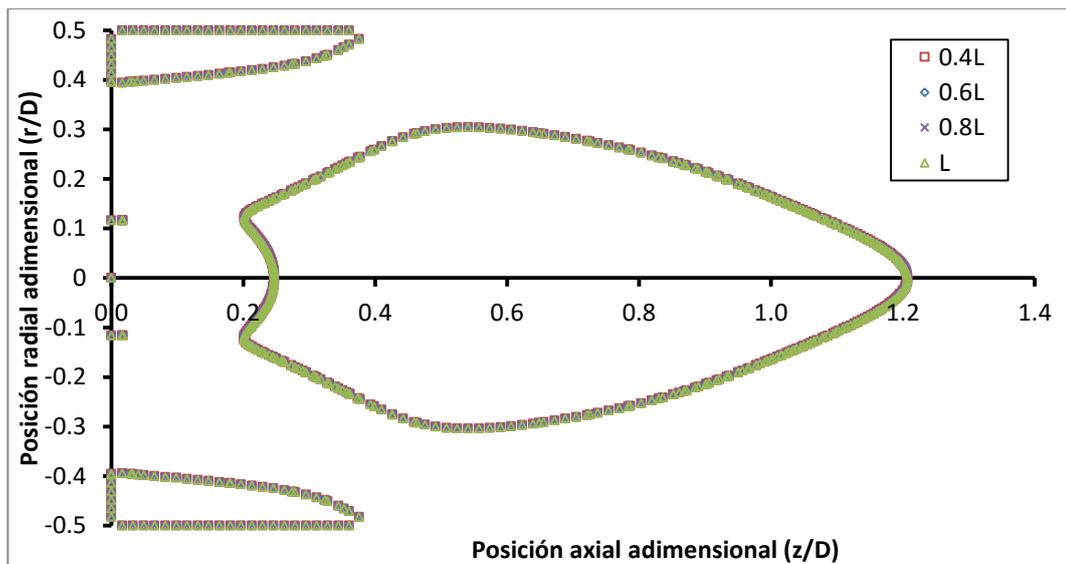


Figura 4-13 Centro de las zonas de recirculación varios tamaños de cámara de ensayo

4.3 Estudio del flujo

En los capítulos anteriores se han ido presentando numerosas características del flujo, pero en este apartado se ampliarán todas ellas.

4.3.1 Estructura aerodinámica

Del análisis de la cinética de combustión de llamas con flujos rotantes realizado en el capítulo 2, se concluye que la estabilidad de la llama no depende únicamente de la cinética de reacción, sino que está ampliamente afectada por la aerodinámica.

La aerodinámica debe favorecer una mezcla apropiada entre combustible y comburente, previa a la combustión, para satisfacer las demandas en materia de emisiones y prestaciones del quemador, por lo que se requiere:

- Bajas velocidades donde la mezcla fresca esté en contacto con el frente de llama turbulenta
- Transferencia de calor desde la zona de reacción a la zona de mezcla fresca
- Capa de cortadura donde los productos de combustión acondicione la mezcla fresca entrante

La interacción de los dos chorros coaxiales da lugar a unas zonas características del quemador llamadas zonas de recirculación ya que la expansión radial de los chorros debido al giro induce el arrastre del fluido de los alrededores siendo esta característica la precursora de la mezcla. Este fenómeno se conoce como la ruptura de vórtice o *vortex breakup* y ayuda a la combustión estable.

Para comprender el flujo es necesario acudir al campo de velocidades en la zona más importante, la zona donde se produce las recirculaciones. La Figura 4-14 muestra el patrón de flujo en el interior de la cámara de ensayo. Las líneas continuas interiores se han definido como las líneas de velocidad nula y por lo tanto delimita los centros de las zonas de recirculación interior y exterior.

Se describen a continuación de forma cualitativa las principales zonas del flujo:

- La zona de recirculación exterior (ORZ) existe aunque el flujo no sea rotante, es decir solo se debe a la expansión brusca. Está localizada entre el chorro que se expande y la pared de la cámara de ensayo y tiene forma toroidal.
- La zona de recirculación interior (IRZ) aparece cuando el chorro rotante entra en la cámara de ensayo. Esta característica se asocia con la rotación del flujo. Esta zona tiene un alto nivel de turbulencia y cortadura, por lo tanto genera una alta tasa de mezcla. La zona de recirculación interior se desarrolla a lo largo del eje del chorro. El flujo es reverso en la parte central de la zona de la cámara de ensayo. Dentro de esta región no hay vorticidad en el eje. El tamaño axial de la zona de recirculación viene dado por un punto de remanso situado en el eje del chorro, aguas abajo de la entrada a la cámara de ensayo. La IRZ tiene una forma de bulbo con vórtices contra-rotantes axilsimétricos y está longitudinalmente limitada por dos puntos de remanso en el eje de la cámara.

Es responsable de la desviación del chorro interior y un precursor del alto cizallamiento y por consiguiente de la mezcla. Un rasgo característico es la presencia de flujo reverso en el centro de la cámara y cerca de la salida de las toberas debido a gradientes radiales y axiales de presión.

- La zona de cortadura se genera en la entrefase de los chorros de la tobera interior y la exterior. En esta zona se produce un rápido mezclado debido a la alta turbulencia.

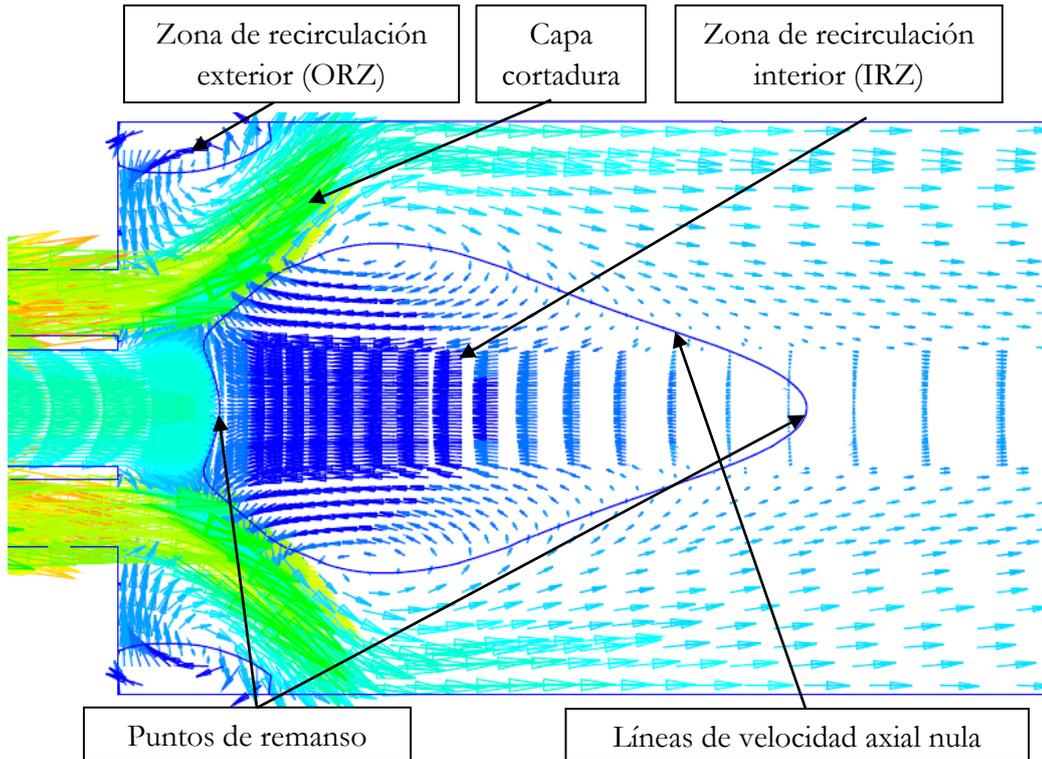


Figura 4-14 Vectores de velocidades y líneas de remanso para un número de Swirl de 1.2 en un quemador de flujo rotante. Simulación RANS con Ansys Fluent.

Se puede apreciar en la Figura 4-15 los vectores de velocidad en caso de tener alto número de swirl. Se muestra que los vórtices de la IRZ y la ORZ son contrarrotantes.

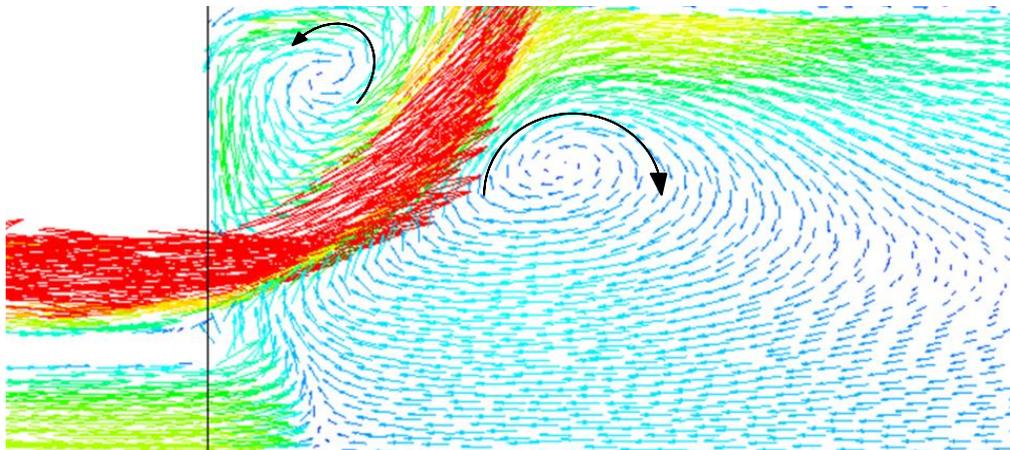


Figura 4-15 Vectores de velocidades para un número de Swirl de 1.2 en un quemador de flujo rotante. Simulación RANS con Ansys Fluent. Visualización de vórtices contrarrotantes.

4.3.2 Dimensionamiento de la zona de recirculación interior

Debido a que la IRZ es la zona más importante, es necesario caracterizar sus dimensiones más significativas. Para ello se empleará una metodología basada en establecer longitudes características entre los centros de los puntos de remanso mediante simulaciones RANS.

La IRZ tiene dos vórtices contrarrotantes y está limitada por dos puntos de remanso en el eje de la cámara (Figura 4-14). Su longitud axial (L_{IRZ}) está determinada por la distancia entre estos puntos de remanso mientras que su longitud transversal (D_{IRZ}) es el máximo tamaño radial de la IRZ. D_{CRZ} es la distancia de entre los centros de los vórtices y X_{CRZ} la distancia a entrada de la cámara. Se muestran todas las dimensiones en la Figura 4-16.

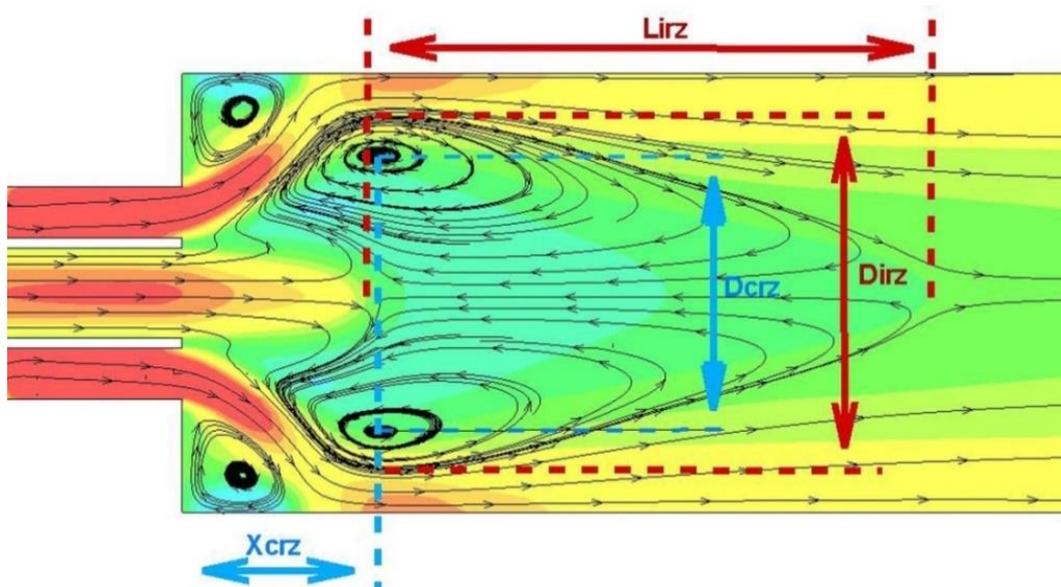


Figura 4-16 Caracterización de la IRZ. Corte transversal.

Se realizan cuatro simulaciones combinando generadores de swirl de placas planas y de aletas curvas con los códigos CFD Ansys Fluent y OpenFOAM. Los casos simulados son G3, G32, G33 y G13.

La Figura 4-17 muestra las líneas de corriente proyectadas en un plano dentro de la cámara de ensayo sobre los contornos de velocidad axial. La mitad superior de las figuras corresponde al modelo OpenFOAM mientras que las partes inferiores son resultados de Fluent. Los marcadores gruesos axiales corresponden a los diámetros de la cámara de prueba. La Figura 4-17 (sup.) muestra el patrón de flujo usando un generador de swirl de aletas curvas mientras que la Figura 4-17 (inf.) muestra los resultados obtenidos de un generador de swirl de placas planas. Como se observa en la Figura 4-17, las simulaciones Fluent parecen ser un poco más disipativas ya que predicen una L_{IRZ} inferior. Esto podría ser debido a la actuación más precisa del modelo $k-\epsilon$ RNG disponible en Fluent. La estimación del diámetro del vórtice (D_{IRZ}/D) es uniforme en las cuatro simulaciones realizadas. Las dimensiones de la zona de recirculación interior se muestran en la Tabla 4-3.

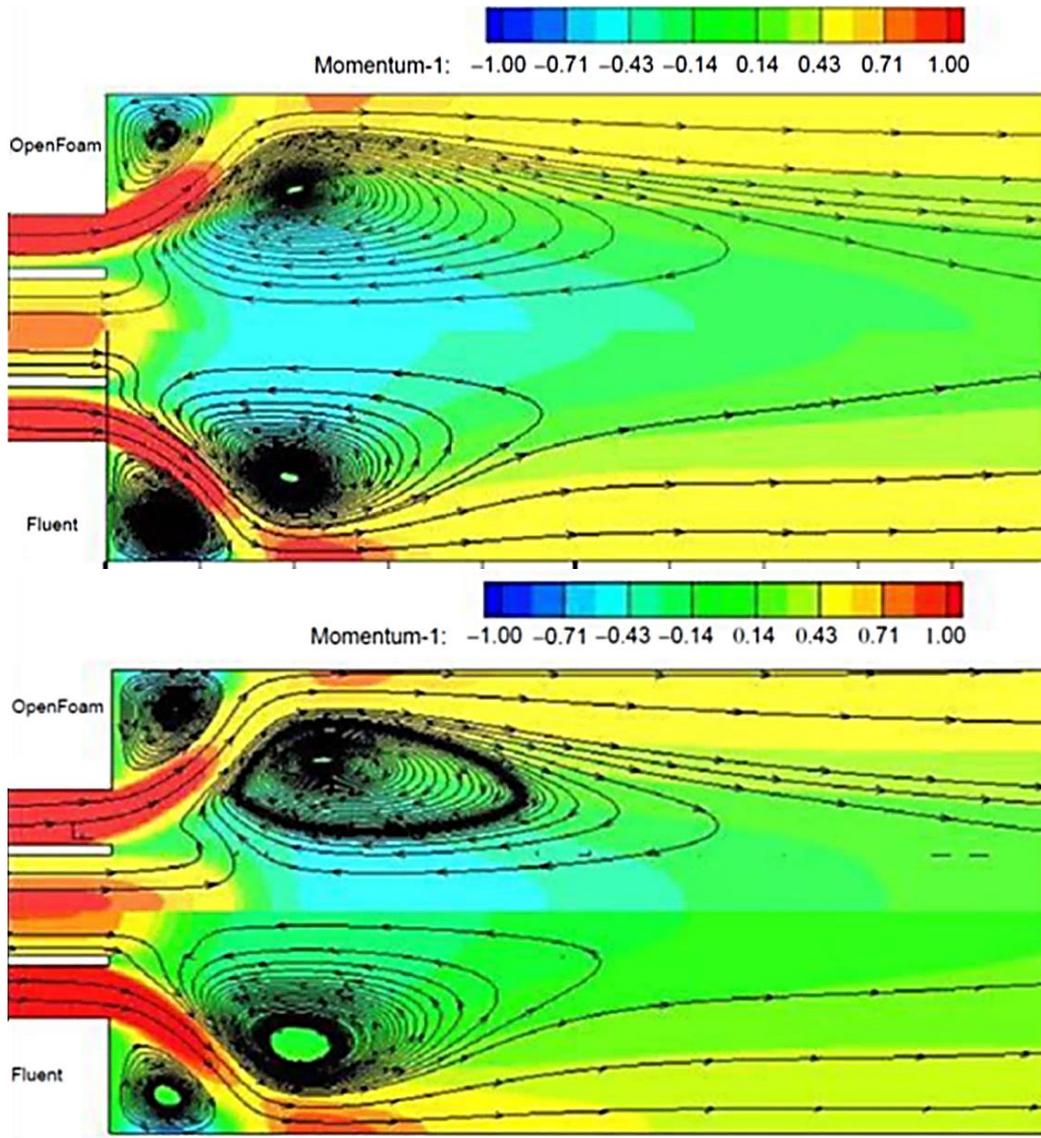


Figura 4-17 Caracterización de la IRZ. Corte transversal para un quemador de flujo rotante. Corte transversal correspondiente a simulación mediante un generador de swirl de aletas curvas (sup.) y de placas planas (inf.) mediante OpenFOAM (mitad superior) y Fluent (mitad inferior).

Tabla 4-3 Longitudes características de la IRZ

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Código CFD	Ansys Fluent	OpenFOAM	Ansys Fluent	OpenFOAM
Generador Swirl	Aletas Curvas	Aletas Curvas	Placas planas	Placas planas
Ángulo salida aletas (°)	72	72	62	62
Número Swirl	1.22	1.46	1.15	1.12
Diámetro anillo (D_{IRZ}/D)	0.86	0.86	0.86	0.86
Distancia longitudinal (L_{IRZ}/D)	1.48	1.66	1.10	1.29
Distancia radial (D_{CRZ}/D)	0.65	0.61	0.61	0.67
Localización axial (X_{CRZ}/D)	0.39	0.37	0.41	0.45

4.4 Influencia del número de swirl

Se describen a continuación la influencia del número de swirl en el patrón de flujo mediante la simulación de tres casos con números de Swirl de 0.3, 0.7 y 1.2 en un quemador de flujo rotante de aletas curvas (29° , 57° , 72°). Los casos analizados son G8, G9 y G13. Se muestran los contornos de velocidad axial y las líneas de corriente proyectadas en un plano en la Figura 4-18 y la Figura 4-19.

- Para números de swirl débiles ($S < S_c$, Figura 4-18, izq. y Figura 4-19, izq.), el chorro tiende a abrirse más que un chorro libre, al englobar fluido del ambiente y al decaer la velocidad en el eje más rápidamente a medida que el swirl aumenta. La única recirculación que aparece es la exterior asociada a la expansión brusca (ORZ, zona de recirculación externa con forma toroidal). A partir de distancias axiales adimensionales superiores a D se producen distribuciones gaussianas de la velocidad axial siendo ésta máxima en el eje de la tobera y disminuyendo al aumentar la distancia radial al eje (ver apartado 3.3).
- Cuando el número de Swirl es cercano al crítico ($S \sim S_c$), la semejanza de los perfiles se alcanza en distancias más alejadas aguas debajo de la tobera pero en ningún caso hay flujo reverso. La Figura 4-18 centro y la Figura 4-19 centro, muestra el patrón de flujo en caso de tener un número de swirl ligeramente superior al crítico pudiéndose apreciar que la zona de recirculación interior se ha formado.
- En cambio, para swirl más altos ($S > S_c$, Figura 4-18, dcha. y Figura 4-19 dcha.), los fuertes gradientes de presión radiales originan una succión tal (gradiente de presión axial negativo), que se forma una zona central de recirculación en forma de bulbo que provoca que la recirculación exterior disminuya de tamaño. La presión a lo largo del eje es capaz de invertir el flujo en el eje de la tobera generando vórtices toroidales que succionan una masa importante de mezcla.

El número de swirl crítico, S_c , no es un valor fijo, sino que existe un rango de transición. Éste suele situarse entre 0.4 y 0.6 y depende de las condiciones del flujo, la geometría y la metodología de evaluación del número de swirl (ver el apartado 4.2.1.3). Los análisis realizados indican que no existe zona de recirculación interior para número de swirl menores que 0.3 y que a partir de número de swirl de 0.47 se comienza a apreciar ésta.

Las zonas de recirculación se ven significativamente modificadas en función del número de swirl. Si se analizan dos generadores de swirl de placas planas con ángulos de salida de las placas de 42° y 62° (Figura 4-20) se obtiene la influencia del número de swirl en el tamaño de las zonas de recirculación que están representadas por la iso-superficie de velocidad axial nula. Cuanto mayor sea el número de swirl, mayor será el IRZ y menor la ORZ. Las tendencias coinciden con las analizadas en Ranga Dinesh et al. (2010). Por otra parte, la parte aguas arriba de la IRZ se mueve hacia la entrada de la cámara cuando el número de swirl aumenta.

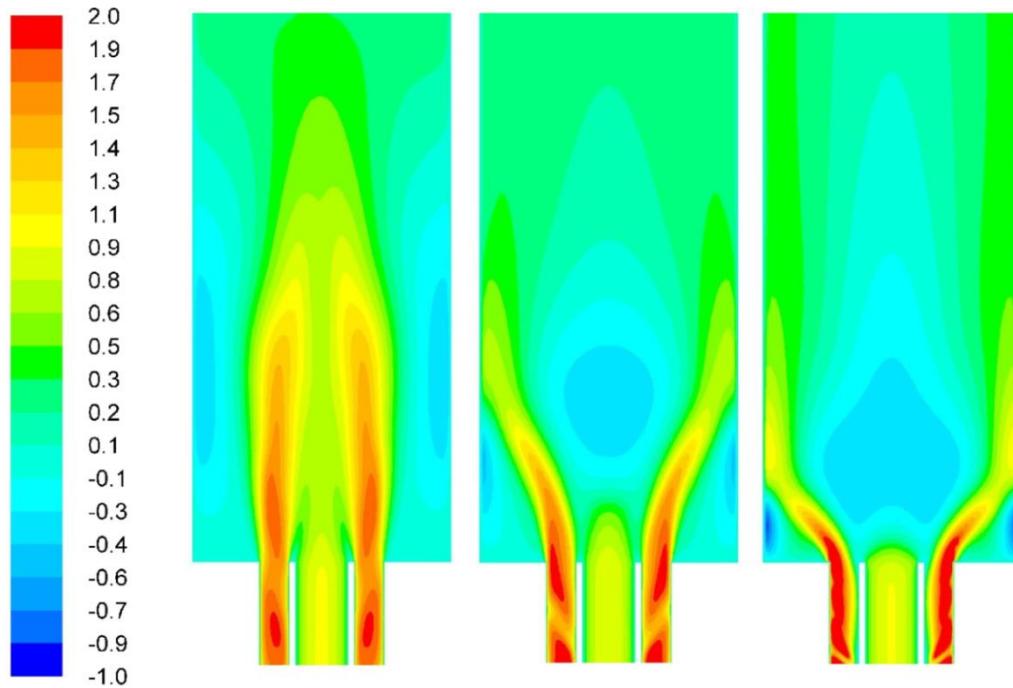


Figura 4-18 Campo de velocidades axiales y líneas de corriente para números de Swirl de 0.3 (izq.), 0.7 (centro) y 1.2 (dcha.) en un quemador de flujo rotante de aletas curvas (29° , 57° , 72°)

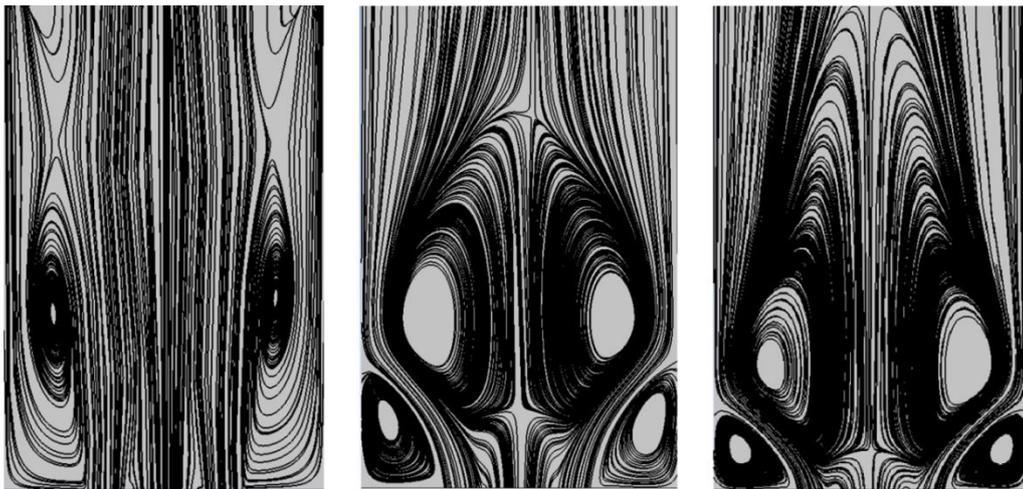


Figura 4-19 Líneas de corriente proyectadas sobre el plano $x=0$. Números de Swirl de 0.3 (izq.), 0.7 (centro) y 1.2 (dcha.) en un quemador de flujo rotante de aletas curvas (29° , 57° , 72°)

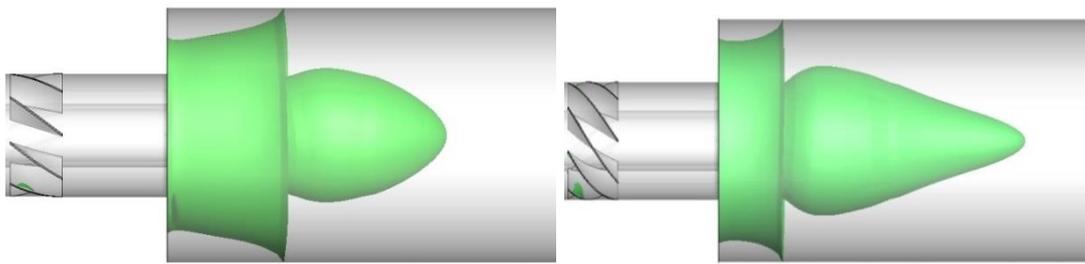


Figura 4-20 Superficies de iso-velocidad nulas para generadores de swirl de placas con ángulo de salida 42° (izq.) y 62° (dcha.). $S=0.55$ y 1.15 respectivamente.

4.5 Análisis de mezclado

4.5.1 Macromezcla

Se mostraron en el capítulo 2 los fundamentos del análisis de la edad del fluido y del tiempo de residencia. La edad del fluido se basa en obtener el tiempo que permanece éste dentro de un recinto, siendo más joven el fluido que menos tiempo ha pasado en el recinto. En caso de tener torbellinos y zonas de recirculación, el tiempo de residencia del fluido puede aumentar.

Este concepto es de vital importancia para el análisis de la formación de contaminantes. La formación de NO_x se debe al efecto del combustible, al efecto térmico o a la formación súbita. La formación de NO_x por efectos térmicos se debe a la oxidación del nitrógeno del aire a alta temperatura. La relativa al combustible resulta de la oxidación del nitrógeno contenido en el mismo. La formación de NO_x súbito tiene lugar por la reacción del nitrógeno del aire con radicales de hidrocarburos.

De forma general la formación de NO_x puede minimizarse mediante un diseño adecuado de las condiciones de la combustión. Un tiempo de residencia superior indica que el fluido es expuesto a altas temperaturas durante más tiempo y esto se relaciona directamente con la formación térmica de NO_x .

La eficiencia del quemador depende directamente de lo bien que los dos chorros son mezclados por lo que el análisis del tiempo de residencia puede ser una herramienta importante para el análisis de contaminantes.

Para obtener el tiempo de residencia es necesario resolver una ecuación de conservación afectada por el transporte convectivo y difusivo, siendo el término fuente la unidad multiplicada por la densidad y siendo el responsable para el envejecimiento.

La ecuación 4-1 describe el tiempo de residencia (ψ).

$$\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \nabla(\rho\mathbf{v}\cdot\psi) = \nabla(\rho D_{\psi}\nabla\psi) + \rho \cdot 1 \quad 4-1$$

El coeficiente de transporte difusivo, D_{ψ} , viene dado por la suma de las difusividades másicas laminar y turbulenta.

Puesto que los códigos empleados no disponen del cálculo del tiempo de residencia del fluido, se implementa una UDF o función definida por el usuario para calcular éste en el modelo numérico.

Se compila la UDF creada, se define una magnitud escalar para el cálculo, se especifica el coeficiente de difusividad deseado y se calcula el tiempo de residencia del fluido con el flujo congelado.

4.5.1.1 Influencia del difusor

Se aplica el concepto de tiempo de residencia del fluido a varios casos con semiángulos de difusor distintos.

En el apartado 3.1.4.2 se detalla más información sobre la geometría de los difusores empleados. Los casos analizados son G13, G14, G15, G16, G17 y G27. Éstos consideran un generador de swirl de placas planas.

Las Figura 4-21 muestra tanto el tiempo de residencia como los campos de velocidad axial en la mitad superior e inferior, respectivamente. El eje axial tiene marcas cada diámetro de la tobera exterior siendo el cero a la salida de las toberas y a la entrada a la cámara de ensayo.

En cuanto a la velocidad axial, los contornos negativos permiten identificar las zonas de recirculación. Cada configuración tiene una zona de recirculación interior cerca del eje asociado con el número de swirl de aproximadamente la unidad.

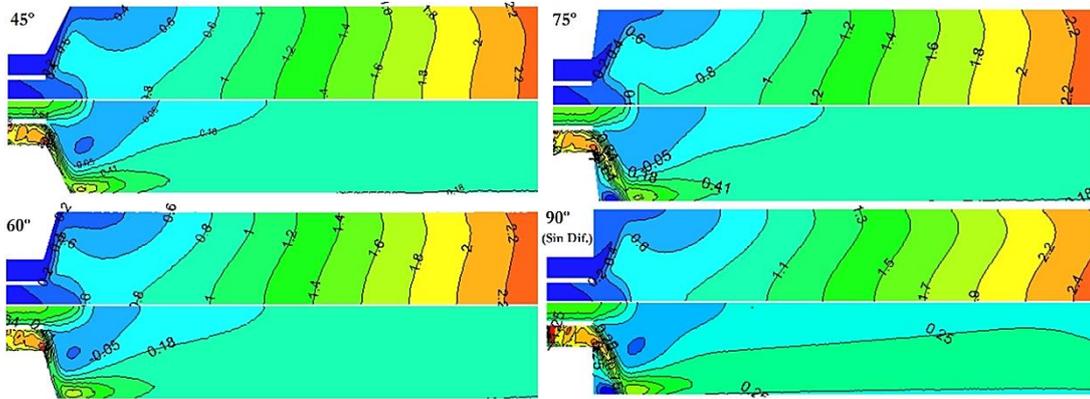


Figura 4-21 Contornos en el plano longitudinal de la cámara de ensayo de tiempos de residencia (Mitad sup.) y velocidad axial (Mitad inf.) para difusores de 45°, 60°, 75° y 90° (sin dif.).

Sin embargo, la separación del flujo cerca de la pared de la cámara está fuertemente afectada por la configuración de difusor. Los modelos sin difusor y difusor de semiángulo 75° muestran una zona de recirculación, mientras que los difusores de semiángulo 60° y 45° no producen recirculación exterior pero se produce un incremento de la velocidad axial debido al confinamiento o al impacto del chorro anular al chocar con la pared.

La presencia de la recirculación cerca de la pared es un precursor del desplazamiento aguas abajo de recirculación en el eje, mientras que los difusores de semiángulo 60° y 45° guían el flujo paralelo a la pared y generan un efecto de confinamiento en la recirculación interna.

El desplazamiento del flujo con velocidad uniforme axial se conoce comúnmente como el flujo de tipo pistón y produciría un aumento lineal del tiempo de residencia con el eje de ordenadas. Se puede observar en la Figura 4-22 el tiempo de residencia del fluido para modelos sin difusor, con un difusor de semiángulo 60° y un difusor de

semiángulo 30° a lo largo del eje, poniendo de manifiesto la tendencia lineal en la parte final del quemador.

Sin embargo, las zonas de recirculación implican el aumento del tiempo de residencia. Teniendo en cuenta el tiempo de residencia en la Figura 4-21, las iso-líneas de tiempo constante son casi paralelas para las distancias axiales de más de 5 veces el diámetro de la tobera exterior, lo que significa que se ha logrado el flujo desarrollado y la velocidad axial es casi uniforme, es decir que se asemeja al flujo de tipo pistón.

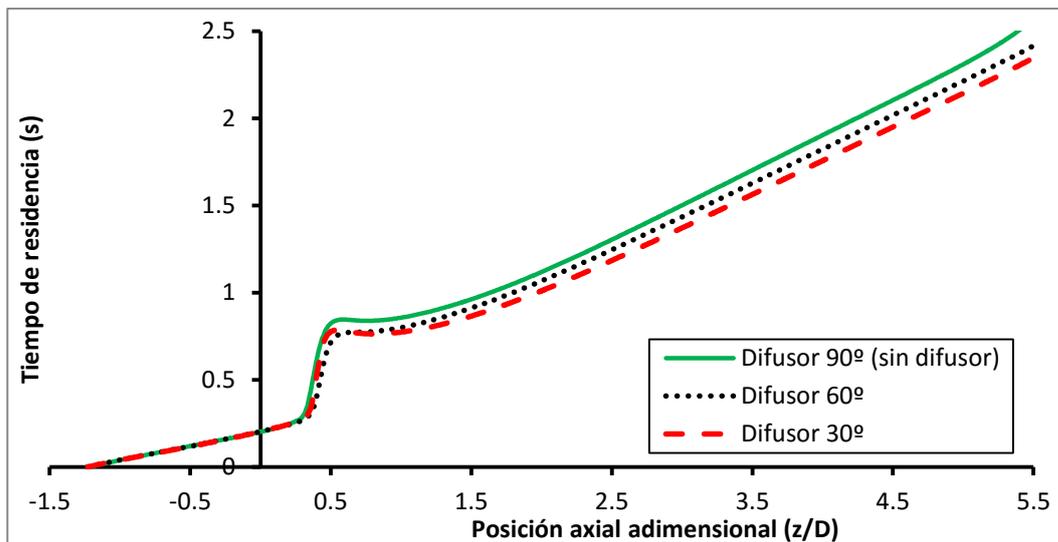


Figura 4-22 Tiempo de residencia a lo largo del eje (izq.) para modelos sin difusor, con un difusor de semiángulo 60° y un difusor de semiángulo 30°. Generador de swirl de placas planas.

La Figura 4-22, evidencia la relación entre el tiempo de residencia y las recirculaciones. Se obtiene un incremento del tiempo de residencia en la zona con un escalón (esta zona se corresponde con las zonas de recirculación). Se puede asociar el incremento de pendiente con la existencia o no de la ORZ. El uso de difusores previene la formación de la recirculación exterior y por tanto disminuye el tiempo de residencia.

El tiempo de residencia medio solamente depende de la velocidad del flujo y el volumen del depósito, por lo tanto es ligeramente afectado por cambios pequeños geométricos. El gradiente del tiempo de residencia puede ofrecer información relevante. La Figura 4-23 muestra el gradiente de tiempo de residencia en dirección y en la parte superior, mientras que en la parte inferior se muestra el gradiente en dirección z. La escala es la misma para los dos contornos.

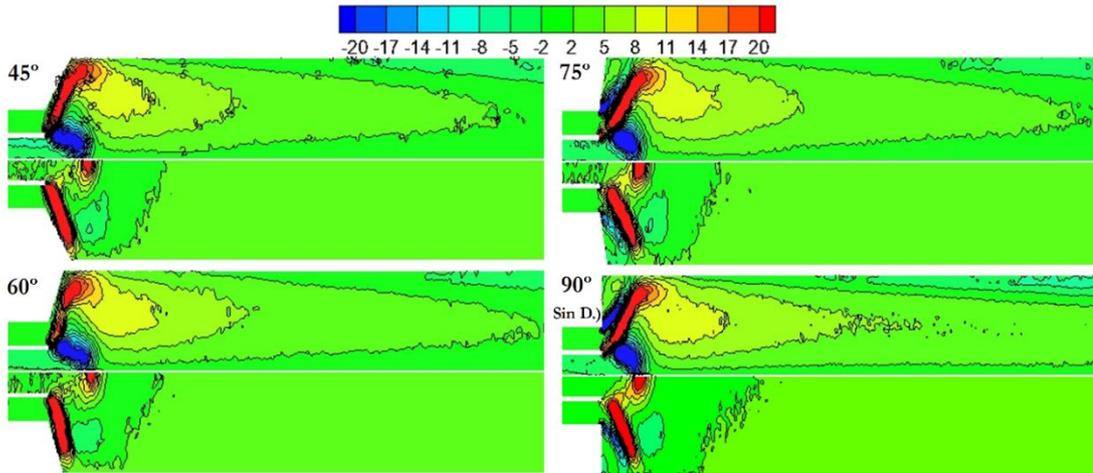


Figura 4-23 Contornos de gradiente de tiempo de residencia en y (Mitad superior.) y en z (Mitad inferior en el plano $x=0$ para difusores de 45°, 60°, 75° y 90° (sin difusor).

4.5.1.2 Influencia del número de swirl

Las zonas de recirculación y por consiguiente los tiempos de residencia se ven modificados notablemente por el número de swirl. Si el tiempo de residencia es alto, el fluido podría exponerse a altas temperaturas durante más tiempo y ocasionar formación térmica de NO_x .

Para estudiar el efecto que produce el número de swirl sobre el tiempo de residencia se ha realizado un postprocesado análogo al anterior para modelos con distintos ángulo de las aletas. La Figura 4-24 y la Figura 4-25 recogen los resultados del análisis de la influencia del número de swirl sobre el tiempo de residencia del fluido. Se muestran los contornos de tiempo de residencia del fluido y los perfiles axiales de tiempo de residencia del fluido para modelos con $S=0.3$, $S=0.7$ y $S=1.2$.

Se obtiene que números de swirl bajos tienen menores tiempos de residencia axiales pero presentan un alto tiempo de residencia en la ORZ por lo que podrían existir problemas de NO_x cerca de ésta. Actualmente se tiende a quemar dosados pobres con bajo número de swirl a pesar de los problemas de estabilidad de la llama. La tendencia inversa ocurre en número de swirl altos en los que no hay problemas de tiempo de residencia en la ORZ pero el tiempo de residencia axial es mayor. No es recomendable el uso de números de swirl intermedios puesto que el tiempo de residencia axial es incluso superior al de altos números de swirl.

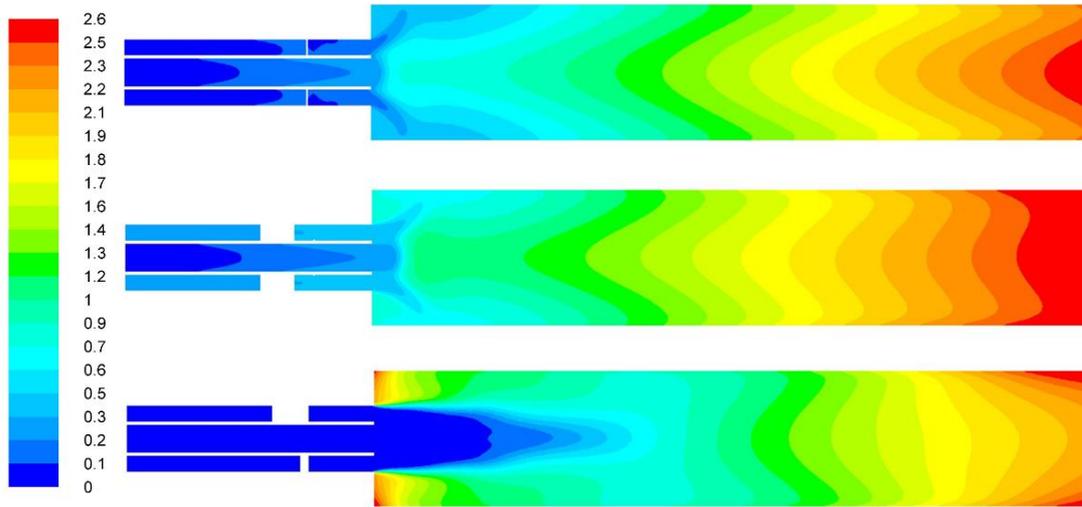


Figura 4-24 Contornos de tiempo de residencia del fluido para modelos con $S=0.3$ (inf.), $S=0.7$ (med.) y $S=1.2$ (sup.)

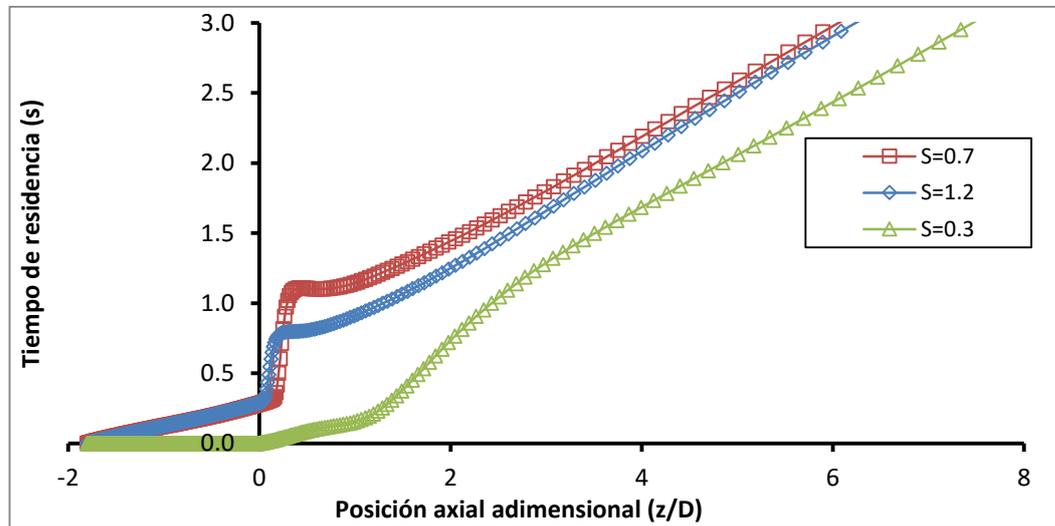


Figura 4-25 Perfiles axiales de tiempo de residencia del fluido para modelos con $S=0.3$, $S=0.7$ y $S=1.2$

4.5.2 Micromezcla

Después de analizar el mezclado macroscópico se analiza el microscópico. Resulta obvio que una mezcla homogénea requiere una composición y estado fluido-mecánico uniforme. Sin embargo, el grado de homogeneidad es relativo, al depender de la escala considerada, ya que en escalas suficientemente pequeñas, cualquier mezcla es heterogénea. El método más simple de medir el grado de mezcla u homogeneidad es en función de las varianzas de una propiedad fluida.

En el análisis que se propone, la mezcla en la macroescala y la mesoescala serán modelados por convección y difusión turbulentas. Estas etapas son requisitos previos para el mezclado en la escala molecular.

En Baldyga (1989) se propuso un modelo de micromezcla genérico para un amplio rango de Schmidt considerando tres estadios de la cascada de energía, desde la

desintegración inercial-convectiva, pasando por el subrango convectivo-viscoso, hasta la disipación difusiva. La ecuación (4-2) es la que gobierna el escalar pasivo, siendo la unidad en el chorro de la tobera interior y nulo en el chorro de la tobera exterior.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i Y) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_t \frac{\partial Y}{\partial x_i} \right) \quad 4-2$$

Baldyga modela el mecanismo de micromezcla como contribución de tres etapas del decaimiento de la varianza: inercial-convectivo, viscoso-convectivo y disipación viscosa difusiva siendo la varianza de la concentración para la etapa j definida en la ecuación 4-3. El primero cubre la macromezcla mientras que la mesomezcla y la micromezcla ocurren en el segundo y tercer estadio siendo la generación de la varianza para subrango inercial-convectivo y la destrucción de la varianza para el subrango inercial-convectivo definidas en las ecuaciones 4-4 y 4-5.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i \sigma_j^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_t \frac{\partial \sigma_j^2}{\partial x_i} \right) + G_{\sigma_j^2} - D_{\sigma_j^2} \quad 4-3$$

$$G_{\sigma_j^2} = \rho D_t \frac{\partial Y}{\partial x_i} \frac{\partial Y}{\partial x_i} \quad 4-4$$

$$D_{\sigma_j^2} = \rho C_\phi \frac{\varepsilon}{k} \sigma_j^2 \quad 4-5$$

Por lo tanto, la micromezcla comienza en la escala Kolmogorov en torbellinos en el que el número local de Reynolds igual a la unidad. El subrango viscoso-convectivo se produce entre las escalas de Kolmogorov.

El tiempo de mezcla en ambos subregímenes viene dado por el tiempo en el que la escala de segregación se reduce desde la macroescala hasta la escala de Kolmogorov. La correlación del tiempo de mezclado para varios números de Schmidt y propuesta por Corrsin se indica en Torbacke (2001).

$$t_m = 2(\Lambda^2/\varepsilon)^{1/3} + [\ln(Sc)/2](\nu/\varepsilon)^{1/2} \quad 4-6$$

Dado que la mezcla de gases de trabajo tiene composición similar al aire con Schmidt próximo a 1, el segundo término representativo del tiempo de mezcla en el subrango convectivo-viscoso es despreciable (4-6).

Aplicando el modelo de Baldyga, se obtienen las varianzas en los diferentes subregímenes, en el caso de fluidos con números de Schmidt cercanos a la unidad, el subrégimen inercial-convectivo es dominante y su menor escala es la de Kolmogorov. La suma de todas las varianzas es la varianza total de la concentración (4-7).

$$\sigma_Y^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 \quad 4-7$$

Fernández-Moguel (2009) implementó este modelo en una simulación con Ansys Fluent por medio de UDF. Se han utilizado dichas UDF en este trabajo.

Así la intensidad de segregación se evalúa mediante la expresión 4-8 donde Y representa el pasivo escalar y δ es una tolerancia pequeña para evitar tendencias asintóticas. Es una medida de la diferencia en una propiedad de núcleos vecinos. Se evalúa como el cociente entre la varianza de una variable y la varianza si no existiese mezcla alguna. Una intensidad de segregación nula indica que la mezcla es homogénea y una intensidad de valor unitario indica mezcla completamente segregada.

$$I_Y = \frac{\sigma_Y^2}{\bar{Y}(1-\bar{Y}) + \delta} \quad 4-8$$

La escala de segregación es una medida del tamaño de núcleos homogéneos. Se puede evaluar como el área bajo la curva del coeficiente de correlación frente a la distancia. Siendo el coeficiente de correlación el ratio entre el producto de las diferencias de la variable frente a la media en dos posiciones separadas una distancia entre la varianza de la variable. Sin embargo este método es bastante complejo de aplicar en fluidos.

La Figura 4-26 muestra una aplicación sobre un modelo con generador de swirl de aletas curvas y número de swirl cercano a uno de la herramienta de caracterización de la micromezcla con el escalar pasivo, la varianza total y la intensidad de segregación. Se observa que los dos chorros se mezclan en posiciones axiales adimensionales de $D/2$. La Figura 4-26 c) indica que a partir la posición axial indicada anteriormente se tiene una mezcla homogénea y no existe gran diferencia entre núcleos vecinos.

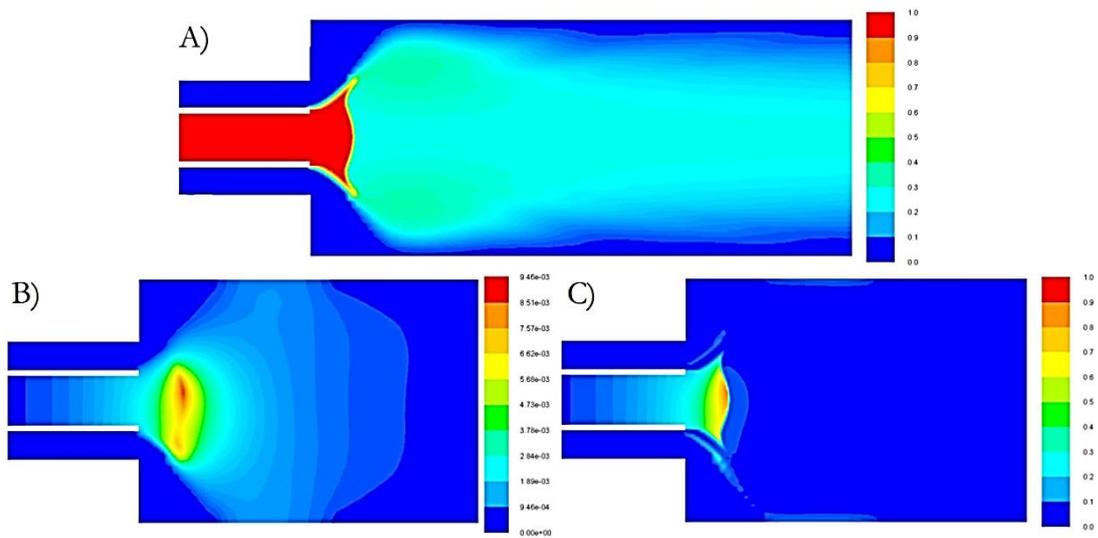


Figura 4-26 Contornos en el plano $x=0$ a) Pasivo Escalar representativo del chorro de la tobera interior b) Varianza total resultante c) Intensidad de Segregación.

4.5.2.1 Influencia del generador de swirl

Si se emplea la herramienta anteriormente propuesta para evaluar la eficiencia de mezclado que tienen los dos generadores de swirl propuestos mediante técnicas RANS se puede apreciar en la Figura 4-27 que si se representan las superficies de iso-valor del 3% de la intensidad de la segregación, para generadores de swirl de aletas curvas (izq.) y para placas planas (dcha.) usando Fluent, las aletas curvas proporcionan un

comportamiento axilsimétrico en la zona de mezcla, lo que ayudará a la estabilidad de la llama, mientras que la iso-superficie del generador de placas planas tiene discontinuidades en la zona de cortadura entre las zonas de recirculación.

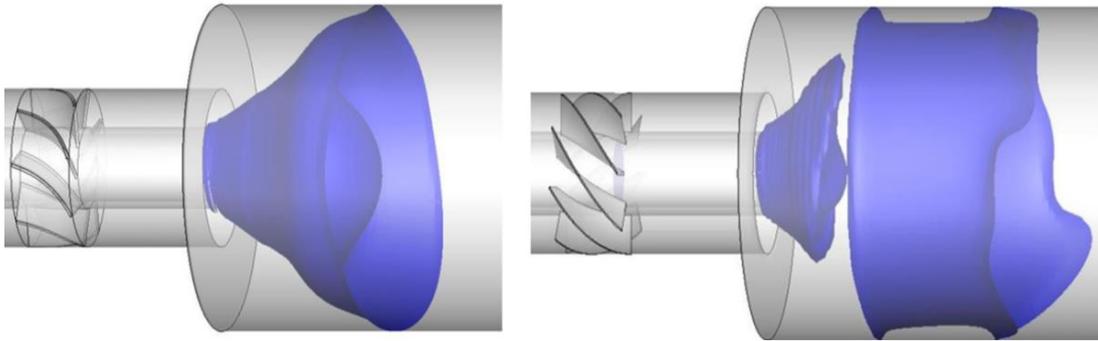


Figura 4-27 Iso-superficie de intensidad de segregación igual al 3% para aletas curvas (izq.) y placas planas (dcha.) Simulaciones RANS con Fluent.

4.6 Conclusiones

Una vez se dispone de un modelo suficientemente validado y robusto se emplea éste para diseñar dos generadores de swirl distintos, estudiar la estructura del flujo y analizar el mezclado. El modelo numérico fue validado en el capítulo anterior con resultados experimentales proporcionados por Roback et al. (1983) y Palm et al. (2005) obteniendo predicciones con un ajuste razonable con los resultados experimentales.

Ha sido necesario establecer una metodología de trabajo para la optimización y el análisis paramétrico de un generador de swirl de un quemador de flujo rotante, puesto que ha sido necesario simular 33 casos distintos.

A pesar de la exigencia computacional para la discretización tridimensional del generador de swirl, se han ensayado numéricamente dos diseños propios, uno con placas planas y otro con aletas curvas. Los análisis han sido realizados con Ansys Fluent y OpenFOAM y han sido mallados con celdas hexaédricas en su mayoría estructuradas. El generador de swirl de aletas curvas consiste en una línea recta seguida por un arco de un círculo de un determinado ángulo de salida, mientras que el de placas planas consiste en superficies planas sin torsión colocadas de forma oblicua al chorro de la tobera exterior.

Ha sido necesario construir mallas distintas para evaluar la bondad del generador de swirl de aletas curvas; seis mallas con ángulos de salida distintos; tres mallas con envergaduras distintas; tres mallas con número de aletas distintas. El análisis de dichos modelos revela que la longitud de la cuerda tiene un ligero efecto sobre el número de swirl y que aumenta las pérdidas de carga, por lo que se propone que sea mínima la parte recta. El aumento en el número de aletas proporciona números de swirl más altos, pero es necesario para llegar a un compromiso con el aumento de las pérdidas de carga y la sencillez constructiva. Se determina que el número de aletas adecuado es ocho. Por último, se concluye que el número de swirl en ambos generadores de rotación se controla de acuerdo al ángulo de salida.

El generador de rotación de placas planas induce un número de swirl mayor que el de aletas curvas, aunque tiene mayores pérdidas de carga, flujos secundarios y menor equilibrio en la dirección radial.

Se han realizado otros análisis paramétricos que concluyen que el flujo aguas abajo del generador de swirl es igual si el fluido entra a las toberas de forma anular, que si entra de forma radial. La misma tendencia tiene lugar en caso de disponer de cámaras de ensayo de diferente tamaño.

El patrón de flujo ha sido cuidadosamente estudiado y se han determinado diferentes estructuras en el flujo como la ruptura del vórtice o *vortex breakup* que se relacionan con las zonas de recirculación interior (IRZ) y exterior (ORZ) y la capa de cortadura. Se determina que los vórtices de la IRZ y la ORZ son contrarrotantes. Se han cuantificado parámetros de la IRZ con dos *solver* distintos, Ansys-Fluent y OpenFOAM y generadores de swirl de placas planas y aletas curvas.

El estudio de la influencia del número de swirl indica que existen dos tendencias. La primera ocurre para número de swirl débil y consta solo de ORZ. En la segunda, en números de swirl altos, los fuertes gradientes de presión radiales originan una succión tal que se forma una zona central de recirculación interior o IRZ en forma de bulbo. No existe un número de swirl crítico fijo, sino que existe un rango de transición entre tendencias. Además está influenciado por la condición de contorno de intensidad turbulenta. Se ha determinado que el aumento del número de swirl implica una mayor IRZ y una ORZ más pequeña.

Por último se ha realizado un análisis del mezclado desde dos puntos de vista, la macromezcla y la micromezcla.

Para analizar las características de la macromezcla, se pueden postprocesar los resultados obtenidos y obtener el tiempo de residencia con una ecuación de conservación adicional. Las zonas de recirculación interior aumentan el tiempo de residencia con el consecuente aumento de la formación térmica de NO_x en caso de combustión.

Se ha analizado el efecto que produce el empleo de varios difusores cónicos sobre el tiempo residencia, concluyéndose que los difusores tienden a reducir el tiempo de residencia con referencia al caso sin difusor.

También se analiza la influencia del número de swirl sobre el tiempo de residencia. Se obtiene que números de swirl bajos tienen menores tiempos de residencia en dirección axial pero presentan un alto tiempo de residencia en la dirección radial y en concreto en la ORZ, por lo que podrían existir problemas de NO_x cerca de la ORZ. La tendencia inversa tiene lugar para números de swirl altos.

Por último y de forma análoga a la macromezcla, mediante un post procesado, un modelo de mezcla se ha adaptado para número Schmidt próximo a la unidad, para calcular la micromezcla a través de la varianza de tres escalares pasivos asociados a diferentes procesos de transporte, usando el modelo de Baldyga (1989), el cual ha sido implementado por Fernández-Moguel (2009) con UDF.

Este es un procedimiento para medir la calidad de la mezcla en la capa de cortadura entre las zonas de recirculación.

Mediante la evaluación de la intensidad de la segregación se obtiene que el generador de swirl de aletas curvas proporciona un mejor comportamiento axilsimétrico que el de placas planas.

Los resultados relativos al desarrollo y optimización de modelos isoterms RANS (Capítulo 3), así como, los relativos al diseño de dos generadores de swirl y estudio del flujo (Capítulo 4) se han materializado en la publicación indexada del JCR: Teresa Parra-Santos, J.R. Pérez-Domínguez, R.Z. Szasz, F. Castro-Ruiz, (2015) "An isothermal analysis of curved-vane and flat-vane swirlers for burners", *Engineering Computations*, Vol. 32 Iss: 3, pp.668 – 686.

4.7 Referencias

- [113]. Baldyga, J. (1989). Turbulent Mixer Model with Application to Homogeneous, Instantaneous Chemical Reactions. *Chemical Engineering Science*, vol. 44, no. 5, pp. 1175-1182. ISSN 0009-2509.
- [114]. Cho, N.H., Fletcher C.A.J., (1991). Computation of Turbulent Conical Diffuser Flows Using a Non-Orthogonal Grid System. *Computers & Fluids* vol. 19, no. 3/4, pp. 347- 361.
- [115]. Clausen P. D., Koh S.G. and Wood, H. (1993). Measurements of a Swirling Turbulent Boundary Layer Developing in a Conical Diffuser. *Experimental Thermal and Fluid Science*; vol. 6, pp.39-48.
- [116]. Durox, D., Moeck J.P., Bourgooin J.F., Morenton, P. Viallon M., Schuller T. and Candel S. (2013). Flame dynamics of a variable swirl number system and instability control. *Combustion and Flame* vol. 160, no. 9, pp. 1729–1742.
- [117]. Fernandez-Moguel, L. (2009), “Modelisation par CFD de la precipitation du carbonate de baryum en reacteur a lit fluidise”, PhD Thesis, National Polytechnic Institute of Lorraine, Nancy.
- [118]. Okhio C. B., Horton H. P., and Langert G. (1983). Effects of swirl on flow separation and performance of wide angle diffusers. *Int. J. Heat & Fluid Flow*, vol. 4 no. 4 pp. 199- 206.
- [119]. Oystein, S. (2004). Experimental and theoretical studies of a Low NO_x swirl burner. PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology.
- [120]. Palm, R., Grundmann, S., Jakirlic, S., and Tropea, C. (2005). Experimental investigations and modelling of flow and turbulence in a swirl combustor. *Proc. of 4th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, Williamsburg, VA, USA.
- [121]. Pereiras, B. (2008). Optimización de una turbina de impulso radial para el aprovechamiento de la energía del oleaje. PhD Thesis. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Valladolid.

- [122]. Pordal, H. S., Khosla P. K. and Rubin S. G. (1993). Pressure Flux-Split Viscous Solutions for Swirl Diffusers. *Computers Fluids*, vol. 22, no. 4/5, pp. 663-683.
- [123]. Ranga Dinesh, K.K.J., Kirkpatrick, M.P. and Jenkins, K.W. (2010). Investigation of the influence of swirl on a confined coannular swirl jet. *Computers & Fluids*, vol. 39 no. 5, pp. 756-767.
- [124]. Roback, R. and Johnson, B.V. (1983). Mass and Momentum Turbulent Transport Experiments with Confined Swirling Coaxial Jets. NASA Technical Reports NASA-CR-168252 .
- [125]. Sheen, H., Chen, W., Jeng, S., Huang, T.L. (1996). Correlation of swirl number for a radial-type swirl generator. *Exp. Thermal Fluid Sci.*, vol.12, no.4, pp. 444–451.
- [126]. Torbacke, M. (2001). On the influence of mixing and scaling-up in semi-batch reaction crystallization. PhD thesis. Royal Institute of Technology, Stockholm.

CAPÍTULO 5

MODELO LES

5	ANÁLISIS ISOTERMO LES.....	147
5.1	INTRODUCCIÓN.....	147
5.2	SIMULACIÓN DE GRANDES REMOLINOS DEL FLUJO EN QUEMADORES...	147
5.3	METODOLOGÍA.....	148
5.3.1	Simulación de grandes remolinos explícita. Modelo de Smagorinsky...	150
5.3.2	Simulación de grandes remolinos implícita. Discretización de escalas selectivas.....	151
5.4	MODELO NUMÉRICO	152
5.4.1	Casos analizados	153
5.5	ANÁLISIS DE INDEPENDENCIA DEL MALLADO	154
5.6	OPTIMIZACIÓN DEL CÁLCULO EN PARALELO.....	155
5.7	ANÁLISIS EXPLÍCITO E IMPLÍCITO.....	158
5.7.1	Análisis explícito. Modelo de Smagorinsky.....	158
5.7.2	Análisis implícito. Scale Selective Discretization. Validación.....	160
5.8	INFLUENCIA DEL NÚMERO DE SWIRL.....	167
5.9	ESTRUCTURAS DE VÓRTICES.....	168
5.10	ESPECTRO DE LA ENERGÍA TURBULENTE.....	171
5.11	PROPER ORTHOGONAL DECOMPOSITION (POD).....	173
5.11.1	Metodología	173
5.11.2	POD en quemadores de flujo rotante.....	175
5.12	PRECESSING VORTEX CORE (PVC)	177
5.13	DIFUSOR EN LA CÁMARA DE ENSAYO.....	180
5.14	EFICIENCIA DE MEZCLADO.....	184
5.14.1	Influencia del número de swirl.....	184
5.14.2	Influencia del difusor.....	185
5.15	CONCLUSIONES	187
5.16	REFERENCIAS.....	189

5 ANÁLISIS ISOTERMOS

5.1 Introducción

Los flujos turbulentos se caracterizan por tener una amplia gama de escalas espaciales y temporales. Las grandes escalas son del orden de la longitud característica del problema, mientras que las pequeñas son las causantes de la disipación de la energía cinética turbulenta.

Hoy día es posible resolver todo el espectro de energía turbulenta, sin modelarlo, mediante DNS aunque no es viable para problemas con un Reynolds alto o una ligera complejidad geométrica o de condiciones de contorno.

El modelo del LES se apoya en la isotropía y universalidad de las pequeñas escalas de la turbulencia. Se resuelven únicamente las grandes escalas de la turbulencia y se aproxima el efecto de las pequeñas, gracias al mayor carácter isotrópico. Por esto el modelo LES necesita una discretización menos fina que el DNS y reduce notablemente el coste computacional en comparación éste. Se sitúa entre DNS y RANS en términos de escalas resueltas.

Los grandes remolinos contienen la mayor parte de la energía cinética turbulenta. En los modelos RANS, los grandes remolinos son modelados, mientras que en los modelos LES son resueltos, lo que se puede traducir en una mayor precisión.

Las desventajas del método LES son la necesidad de requisitos importantes de malla y de alta capacidad de cálculo. Además, se necesita mucho más tiempo de cálculo que en modelos RANS para obtener una convergencia adecuada y variables promediadas, por lo que es de vital importancia la computación en paralelo usando clústeres de cálculo. Tiene limitaciones en la simulación de flujos próximos a la pared ya que cerca de ésta los grandes remolinos se vuelven relativamente pequeños. En la actualidad se trabaja en desarrollar funciones que adapten los resultados cerca de la pared.

Las técnicas LES están creciendo muy rápido en la actualidad y se empiezan a usar tanto en el mundo académico, como en la industria. Se presentan como una de las herramientas numéricas más viables y prometedoras para la simulación de flujos turbulentos.

5.2 Simulación de grandes remolinos del flujo en quemadores

Para predecir el flujo medio en el diseño de quemadores y cámaras de combustión se suelen utilizar técnicas RANS (Congedo et al. 2013). Existen ciertas inestabilidades de la combustión, como el PVC o las fluctuaciones de presión deben ser descritas mediante flujo no estacionario con mucho más grado de detalle.

Otros problemas frecuentes que requieren una mayor precisión de cálculo son el flashback, puntos calientes, o el apagado de la llama (Wang et al. 2005). Es un reto conseguir una precisión buena con un coste computacional aceptable. Las tendencias actuales en la simulación de la combustión en turbinas de gas pasan por el empleo de

modelos LES. Algunos de los trabajos más interesantes sobre modelos LES y turbinas de gas son los realizados por Al-Abdeli et al. (2015), Albouze et al. (2009), Bulat et al. (2015), Esclapez et al. (2015), Gicquel et al. (2012), Kitano et al. (2016), Subramanian et al. (2010), Sengissen et al. (2007) y Riber et al. (2009).

Estas inestabilidades son uno de los mayores retos en el diseño de turbinas de gas. Los efectos negativos que pueden aparecer son vibraciones, fatiga, reducción de la transferencia de calor, reducción el rendimiento o aumento de las emisiones.

En Yang, 2015 se puede consultar la evolución histórica y el estado actual de los modelos LES, centrándose principalmente en los quemadores de las turbinas de gas.

En Domingo et al. (2005) se presentan modelos LES con diferentes sub-grid scales para predecir flujos turbulentos en expansiones bruscas.

En García-Villalba et al. (2006) se estudian estructuras coherentes para flujos rotantes no confinados para varios números de swirl. Mientras que en Duwig et al. (2005) se analiza el núcleo del vórtice de precesión (PVC) en la IRZ.

Valera-Medina et al. (2009) emplea modelos LES con diferentes sub grid scales para resolver el problema de cierre de combustión turbulenta de las llamas en V con expansiones bruscas similares al caso de Roback et al. (1983).

Se espera que los modelos LES describan la mezcla con mayor precisión que los métodos tradicionales RANS, sobretodo los efectos transitorios.

5.3 Metodología

El objetivo de este capítulo es analizar la interacción de chorros coaxiales no reactivos, con rotación del chorro exterior, mediante técnicas de simulación de grandes remolinos (LES). Se estudian el submodelo explícito LES de Smagorinsky y un modelo LES implícito. Además se analiza una propuesta novedosa, Selective Scale Discretization (SSD), basada en la selección de escalas a discretizar en los términos de convección para las ecuaciones de Navier-Stokes.

Los patrones de flujo promediados se comparan con los datos experimentales de la referencia clásica de Roback et al. (1983). El modelo se desarrolló utilizando las bibliotecas de OpenFOAM que tienen ventajas sustanciales para la computación de alto rendimiento High Performance Computing (HPC), tales como la computación paralela, usando cientos de nodos. Además, se desarrolló un modelo adicional con Ansys Fluent para analizar y comparar el espectro de la energía.

LES resuelve las escalas grandes e intermedias, mientras que las más pequeñas se modelan. Básicamente, se aplica un filtro espacial y las nuevas variables desconocidas son la disipación de las escalas más pequeñas, que deben ser modeladas para resolver el problema de cierre. La diferencia de modelado es lo que permite obtener distintas variantes de LES.

Para la obtención de las ecuaciones del método LES se plantean las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos incompresibles.

Las ecuaciones LES se obtienen mediante la aplicación de un filtro de paso bajo (Ecuación 5-1), que permite el paso de bajos números de onda ($2\pi/\epsilon$) o escalas intermedias o grandes, mientras filtra los altos números de onda (o escalas pequeñas). $\bar{\tau}_{ij}^{sgs}$ representa los esfuerzos de las pequeñas escalas, conocidos como subgrid stress tensor o tensor de esfuerzos de la submalla.

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_j \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} \quad 5-1$$

Debido a que el último término no depende de las variables filtradas, hay que transformarlo y de manera análoga a los modelos RANS, se resolverá el problema del cierre obteniendo una expresión del tensor SGS. Se considerará pues los efectos del SGS de forma similar a los efectos viscosos. En resumen, se tendrá que estimar un coeficiente de viscosidad turbulenta. Existen varios modelos LES en función de las expresiones de cierre y de filtrado.

La operación de filtrado en LES puede ser implícito o explícito. En el filtrado explícito, un filtro de LES se aplica a las ecuaciones de Navier-Stokes discretizadas, proporcionando una forma de filtro bien definida y reduciendo el error de truncamiento. Sin embargo, el filtrado explícito requiere una malla más fina que el filtrado implícito, y el coste computacional aumenta con Δx^4 . En Sagaut (2006) se puede consultar más información sobre los métodos numéricos.

El filtrado implícito tiene la ventaja de tener menos requisitos de malla pero el inconveniente de tener un error de truncamiento mayor como se indica en Grinstein et al. (2007).

En caso emplear métodos LES implícitos, no se implementa ningún modelo SGS. En modelos implícitos el ancho de filtro está relacionado con el tamaño de malla, por lo que el papel de los efectos disipativos es jugado por un error de resolución numérica.

Existen diferentes técnicas en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes, para la construcción de métodos conservativos, que permitan una representación precisa de los vórtices sin introducir oscilaciones o difusión excesiva en la solución.

Tal es el caso de los métodos Godunov, esencialmente métodos no oscilatorios (ENO), total-variation-diminishing o métodos de variación total decreciente (TVD) o métodos con transporte con flujo corregido (FCT).

Los métodos con transporte con flujo corregido (FCT) y transporte de flujo limitados se han desarrollado en mallas estructuradas para hacer que la solución siga siendo monótonamente positiva al utilizar un esquema de alto orden. Se buscan soluciones con un esquema de primer orden upwind y un esquema de segundo orden.

El error numérico de transporte convectivo se controla usando diferentes tipos de limitadores y esquemas. Se utiliza una variación total decreciente (TVD), para evitar la

formación de oscilaciones numéricas en las regiones de alto gradiente como se indica en Oran et al. (2000).

El algoritmo TVD es un esquema de resolución en diferencias finitas que asegura que las variables de las ecuaciones de conservación se mantienen monótonas y positivas. Se utiliza un limitador aplicado en el esquema de discretización de alto orden, por lo que evita que las oscilaciones espurias aparezcan. Cuanto más grande es el limitador se logra una mejor precisión, pero una peor convergencia.

5.3.1 Simulación de grandes remolinos explícita. Modelo de Smagorinsky

Es una aproximación clásica para la simulación de grandes remolinos. El tensor de SGS o sub grid stress es predicho por el modelo Smagorinsky propuesto en 1963 y recopilado en Pope (2010) como función del tensor de deformación y una viscosidad de sub grid stress.

Debido a su sencillez es el más conocido. Emplea un filtrado espacial rectangular de forma que se modela la disipación de los pequeños torbellinos con expresiones que permiten el cálculo aproximado de los coeficientes de viscosidad, de conductividad térmica y de difusividad másica.

El problema del cierre se resuelve modelando el tensor subgrid stress en función de la viscosidad turbulenta SGS como:

$$\bar{\tau}_{ij}^{sgs} = 2\mu_{sgs}\bar{S}_{ij} \quad 5-2$$

El tensor de deformación y la viscosidad de subgrid stress se definen en 5-3 y 5-4.

$$\bar{S}_{ij} = 0.5 \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad 5-3$$

$$\mu_{sgs} = \rho(C_s\Delta)^2 \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad 5-4$$

Teniendo en cuenta que el modelo LES funciona bien lejos de las paredes donde la turbulencia es isotrópica, un requisito del modelo Smagorinsky es el uso de la función de pared de amortiguación de van Driest's para cancelar el tensor de esfuerzos en la malla en las zonas cercanas a las paredes (5-5).

$$f_\mu = 1 - e^{-\frac{y^+}{25}} \quad 5-5$$

Según Davidson (2007), la resolución espacial del mallado en la pared debe ser del orden de $\Delta y^+ = 1$, $\Delta x^+ = 100 \cdot \Delta y^+$, $\Delta z^+ = 30 \cdot \Delta y^+$.

El modelo Smagorinsky tiene una gran desventaja, la determinación de un coeficiente empírico para el cálculo de la nueva viscosidad que además va a influir en la conductividad y la disipación. Este coeficiente se denomina coeficiente de Smagorinsky (C_s), cuyo valor aproximado fue dado por Lilly en 1967 pero en la actualidad se suele ajustar mediante ensayos experimentales en función de la aplicación.

Otra desventaja del modelo es el filtrado ya que es computacional y automático, empleando un mallado espacial rectangular que ha de ser uniforme en todas las direcciones. Además, los resultados son muy sensibles al mallado y pueden existir imprecisiones en las paredes por lo que requiere $y^+ \approx 1$.

Además del modelo Smagorinsky, existen las variantes derivadas:

- Submodelo de similaridad de escala
- Submodelo dinámico de Germano (Germano et al. 1991)
- Submodelo de función estructural

5.3.2 Simulación de grandes remolinos implícita. Discretización de escalas selectivas

Adicionalmente, para contrastar los resultados obtenidos con un método explícito, se va a emplear un método implícito LES (ILES), utilizando la discretización de escalas selectivas o Scale Selective Discretization (SSD), propuesto por Vuorinen et al. (2012). El modelo implícito LES (ILES) seleccionado, utiliza un ancho de filtro en relación con el tamaño de malla y no se aplica ningún modelo subgrid. Se demostrará que modelos ILES con SSD son capaces de predecir los flujos rotantes.

En el método SSD, las pequeñas escalas se identifican usando un filtro de paso alto, que en el caso que aplica es un filtro Laplaciano. Esto significa que logran superar el filtro las escalas relativamente pequeñas (que se corresponden con un alto número de onda). La fluctuación de la velocidad se muestra en la ecuación 5-6.

$$u'_i = \left(\frac{\Delta}{\pi}\right)^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j}\right) \quad 5-6$$

El ancho de filtro está relacionado con la resolución espacial local elegida, por lo que el ancho (Δ) será $2\Delta x_i$ siendo Δx_i definido como el espaciado de la malla en la dirección i .

Dado que el tensor de esfuerzos de la submalla tiene un carácter disipativo, este papel es desempeñado por el error numérico tal como se propone en Oran et al. (2000) y Bensow et al. (2010). Por lo tanto, este error debe ser reducido para que corresponda con la disipación de las pequeñas escalas.

5.3.2.1 Scale Selective Discretization scheme

El algoritmo numérico empleado es Selective Scale Discretization (SSD) o discretización de escalas selectivas propuesto por Vuorinen et al. (2012) para incrementar el alto rendimiento de LES. Esta técnica tiene la intención de reducir la disipación numérica asociada a los esquemas upwind.

Identifica escalas grandes con un filtro de paso bajo, con una anchura similar a la dimensión de la malla. Éstas son resueltas con un esquema de orden superior. Las escalas pequeñas responsables de fluctuaciones deberán resolverse con un esquema mixto entre bajo y alto orden.

Primeramente la separación de las escalas se hace usando un filtro de paso alto con un operador dependiente del número onda de Nyquist.

El segundo paso es la descomposición de la velocidad en la media y la parte fluctuante.

Se debe resolver la velocidad media con un esquema de segundo orden, mientras que la fluctuante debe ser resuelta con un esquema mixto entre primer y segundo orden. Sin embargo, plantear esta distribución en el transporte convectivo de cantidad de movimiento requiere de un modelo LES explícito tal como se muestra en 5-7.

$$\text{div}(\vec{u}u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j(u_i - u'_i + u'_i)] = \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j(u_i - u'_i)] + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j u'_i) \quad -7$$

En caso de resolución implícita, el término no lineal se transforma en dos términos fuente que se añaden en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento como fuerzas (ecuación 5-8).

$$f_{m,i} = -\frac{\partial}{\partial x_j} [u_j u'_{1i}] + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j u'_{2i}) \quad -8$$

Donde u'_{1i} y u'_{2i} son iguales y resultan del filtro laplaciano. De nuevo, cada término debe ser resuelto con diferentes esquemas, uno con alto orden y otro con bajo orden.

5.4 Modelo numérico

Se han utilizado dos códigos CFD para la simulación de grandes remolinos (Fluent y OpenFOAM). Algunas de las condiciones de contorno y principales características del modelo numérico se indican en la Tabla 5-1.

Los modelos de simulación de grandes remolinos se ejecutan en paralelo utilizando 128 o 256 núcleos, durante 4 ó 2 semanas respectivamente. Para el modelado LES, son tan importantes las velocidades como las fluctuaciones de éstas, por lo que la intensidad de la turbulencia en la entrada de las dos toberas, interior y exterior, provienen de mediciones del caso de prueba de Roback et al. (1983).

La resolución de modelos LES es cara en términos computacionales, por lo que se requiere una mayor capacidad de cálculo. Todos los casos tienen las mismas condiciones de contorno en cuanto a velocidad e intensidad turbulenta.

Los modelos LES desarrollados código libre (OpenFOAM) han sido simulados en los clústeres de supercomputación indicados en el apartado 1.3.

Los modelos LES confeccionados con el código comercial Ansys Fluent han sido resueltos en un clúster de cálculo durante 6-8 semanas aproximadamente.

Tabla 5-1 Detalles del modelo numérico con simulación de grandes torbellinos

Característica	FLUENT	OpenFOAM
Iteraciones/paso	25	
Celdas de mallado (aprox.)	10 millones	10 millones
Máximas iteraciones por paso	40	
Paso temporal	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-5}$
Celdas hexaédricas regulares	75%	-
y^+_{\min}	-	0.049
y^+_{med}	<1 en 90% dominio	2.53
c_s	0.1	-
Swirl a la salida de la tobera exterior	1.081	1.1
Utilidad mallado	Ansys Meshing	<i>SnappyHexMesh</i>
Gradiente	Least Squares Cell Based	
Pressure	Second Order	
Momentum	Bounded central differencing	
Formulación transitoria	Segundo orden	
Acoplamiento P-V Simple	Acoplamiento P-V Simple	PISO
Número de Reynolds (tobera exterior)	3615	
Presión salida cámara combustión	P_{atm}	
Paredes	No deslizamiento	
Velocidad tobera interior	0.66 m/s	
Intensidad de turbulencia tobera interior	12%	
Velocidad tobera exterior	1.5 m/s	
Intensidad de turbulencia tobera exterior	7.5%	
CFL	<1	

5.4.1 Casos analizados

En la Tabla 5-2 se resumen los casos analizados mediante Large Eddy Simulations en el presente capítulo. Se muestra la identificación de cada caso, el código CFD empleado, el número de swirl, las celdas, el modelo LES, el ángulo del difusor y el apartado donde se analiza dicho caso.

Todos los casos han sido simulados con un generador de swirl de aletas curvas.

Tabla 5-2 Casos analizados mediante Large Eddy Simulations

Id. Mod.	Código CFD	Swirl	Celdas x10⁶	Modelo LES	Áng. difusor (°)	Apartado
L1	OpenFOAM	0.45	2.5	E. Smag.	90 (sin dif.)	5.5
L2	OpenFOAM	0.45	10	E. Smag.	90 (sin dif.)	5.5/5.7.1/5.9/5.10
L3	A. Fluent	1.1	10	E. Smag.	90 (sin dif.)	5.7.1/5.10
L4	OpenFOAM	0.45	10	ILES	90 (sin dif.)	5.7.2
L5	OpenFOAM	0.45	10	ILES-SSD	90 (sin dif.)	5.7.2
L6	OpenFOAM	0.6	10	ILES-SSD	90 (sin dif.)	5.8
L7	OpenFOAM	1.2	10	ILES-SSD	90 (sin dif.)	5.8/5.9/5.11/5.12
L8	OpenFOAM	1.2	9	ILES-SSD	90 (sin dif.)	5.13
L9	OpenFOAM	1.2	9	ILES-SSD	80	5.13
L10	OpenFOAM	1.2	9	ILES-SSD	70	5.13
L11	OpenFOAM	1.2	9	ILES-SSD	60	5.13
L12	OpenFOAM	1.2	9	ILES-SSD	45	5.13
L13	OpenFOAM	1.2	9	ILES-SSD	30	5.13
L14	OpenFOAM	0.6	9	ILES-SSD	90 (sin dif.)	5.13
L15	OpenFOAM	0.6	9	ILES-SSD	80	5.13
L16	OpenFOAM	0.6	9	ILES-SSD	70	5.13
L17	OpenFOAM	0.6	9	ILES-SSD	60	5.13
L18	OpenFOAM	0.6	9	ILES-SSD	45	5.13
L19	OpenFOAM	0.6	9	ILES-SSD	30	5.13

5.5 Análisis de independencia del mado

El uso de una malla estructurada con una resolución espacial adecuada y alta calidad es crítico, como se indica en Vuorinen et al. (2012), Duwig et al. (2007) y Davidson (2007) por lo que una malla con estas características fue construida. El criterio de validación de la malla fue la obtención de una predicción razonable del espectro de energía.

Un análisis detallado de la influencia de la malla es obligatorio. En los modelos de ILES, la resolución espacial desempeña el papel de un filtro de escalas más pequeñas que el tamaño de la celda.

En este apartado se simulan los casos L1 y L2 (Tabla 5-2) con OpenFOAM de 2.5 y 10 millones de celdas, que emplean el modelo explícito de Smagorinsky. Este análisis emplea número de swirl de 0.45 para poder comparar los resultados frente a los experimentales de Roback et al. (1983).

La Tabla 5-3 muestra los detalles de los valores de resolución espacial y la Figura 5-1 indica la comparativa con los datos experimentales para mallas de 2.5 y 10 millones de celdas.

Teniendo en cuenta que ambos modelos tienen las mismas condiciones de contorno, es posible llegar a la conclusión mediante la Figura 5-1, que mallas más finas en LES extraen más energía turbulenta del flujo medio generando más turbulencia en las escalas macroscópicas. Esto indica que en los modelos LES es necesario un análisis

de independencia del mallado, para comprobar cuál es el tamaño de malla que permite resolver y no modelar las grandes escalas como ocurre en modelos RANS.

Tabla 5-3 Comparación de las dos mallas empleadas

Resolución espacial	2.5 millones de celdas	10 millones de celdas
Tobera exterior (Re=1129)	D/22	D/46
Tobera interior (Re=3617)	D/32	D/40
Cámara de ensayo (Re=2973)	D/110	D/190
y_{min}^+	0.3255	0.049
y_{med}^+	6.195	2.53

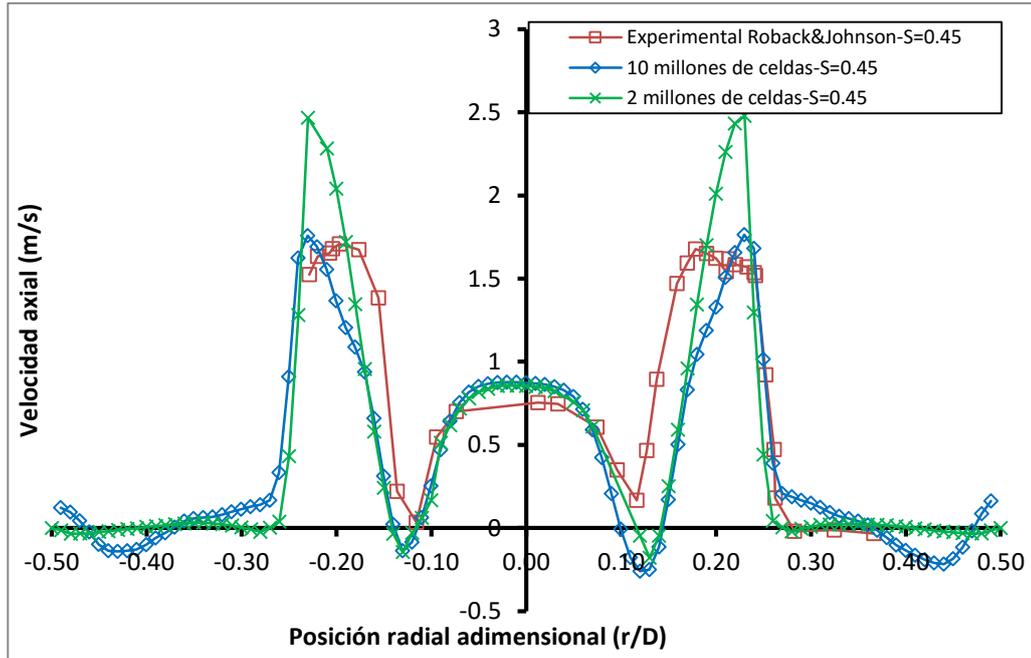


Figura 5-1 Distribución radial de velocidad axial promedio posición axial adimensional = 0.04D
Resultados experimentales (Roback et al. 1983)

Se aprecia que la influencia de la malla en modelos LES es inversa a la que se obtiene en modelos RANS. En modelos RANS, mallas más gruesas proporcionan resultados más disipativos y con velocidades más bajas (ver apartado 3.3.2). En modelos LES mallas más gruesas proporcionan velocidades mayores que mallas más finas, al no extraer la suficiente energía de las grandes escalas.

Además se puede concluir que la malla de 10 millones de celdas captura mejor las principales características del perfil experimental que la malla de 2.5 millones de celdas.

5.6 Optimización del cálculo en paralelo

Puesto que los modelos LES requieren una importante capacidad de cálculo, se estudian las posibilidades de optimización del cálculo al emplear un clúster de computación con muchos procesadores.

La escalabilidad analiza la capacidad del programa para trabajar de forma eficiente en paralelo usando un número significativo de procesadores. Se llama escalabilidad

débil cuando el tamaño de la malla aumenta de forma proporcional al número de procesadores, de forma que cada procesador realiza la misma carga de trabajo. De esta forma, la ejecución eficiente indica que el tiempo de espera hasta los resultados se conserva constante. Los ensayos de escalabilidad fuerte resuelven el mismo problema usando un número de procesadores creciente, con lo cual el tiempo hasta tener resultados disponibles debería disminuir en la misma proporción.

En los estudios de escalabilidad al utilizar técnicas de HPC (High Performance Computing), se analizó la influencia de dos parámetros: uno basado en el procedimiento multigrid y otro basado en la tolerancia del paso predictor del algoritmo PISO de acoplamiento de presión-velocidad. El objetivo era lograr optimizar el proceso de cálculo en paralelo.

La descomposición geométrica del dominio computacional para el procesado en paralelo se realiza bajo la premisa de minimizar el número de celdas en la entrefase puesto que de esta forma se minimiza la transferencia de información entre los procesadores. Sin embargo, este no es un criterio susceptible de mejora u optimización del procedimiento de cálculo en paralelo.

El modelo numérico para los casos no reactivos, se basó en AMG (algebraic multigrid methods). Consiste en una solución rápida que se genera en una malla gruesa con una resolución espacial pobre. A continuación, esta solución se proyecta sobre una malla más fina, usándola como una condición inicial para obtener una solución cada vez más precisa sobre la malla cada vez más fina. De esta forma, se logra una reducción significativa del tiempo de cálculo hasta la convergencia. El parámetro a optimizar es el número de celdas en la malla más gruesa. Fue probado para tres valores 200, 400 y 1200 celdas. Este parámetro no afecta a la solución final. Cuanto mayor es el número de celdas en la malla más gruesa, mejor es el rendimiento para un mayor número de procesadores. Es especialmente importante para las mallas más grandes.

El algoritmo utilizado para el acoplamiento de presión-velocidad es PISO (Pressure Implicit Split Operator) ya que es la opción que proporciona una convergencia más rápida. Básicamente, el procedimiento consiste en resolver las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento para obtener un campo de velocidad provisional. A continuación, la ecuación de corrección de presión se resuelve para obtener el campo de presión corregido. A raíz de la ecuación de corrección de la velocidad se resuelve y se calculan los campos de presión y velocidad actualizadas. En resumen, hay dos pasos: el predictor y el corrector. La puesta en marcha se establece sobre la base de la tolerancia del acondicionador previo. Dos tolerancias se ensayaron 10^{-4} y 10^{-5} . La reducción de la tolerancia aumenta el tiempo con un bajo número de procesadores, pero aumenta el número óptimo de procesadores.

La Figura 5-2 muestra la escalabilidad de la solución del modelo LES resolviendo 11 variables en una malla de 7-9 millones de celdas. La Figura 5-3 muestra la escalabilidad hasta que se encuentra el óptimo en 64 procesadores. Esta curva se obtiene cuando el número de procesadores varía conservando un tamaño fijo del problema.

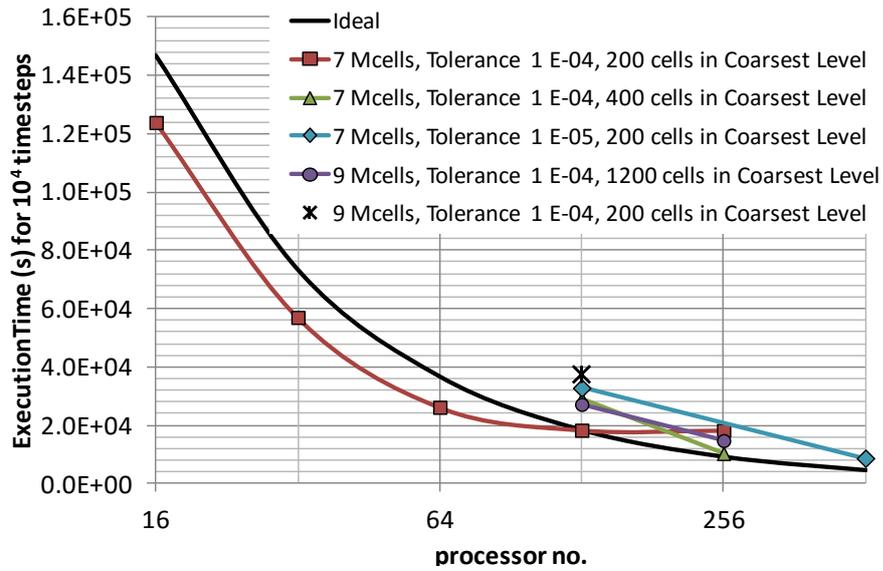


Figura 5-2 Tiempo de ejecución de 10000 pasos temporales de mallas de 7 y 9 millones de celdas usando LES.

El tiempo óptimo de ejecución se da para 128 procesadores utilizando 200 celdas en el nivel malla más gruesa de la multigrad y la tolerancia 10⁻⁴ del algoritmo PISO. Un mejor rendimiento se consigue con 256 procesadores, cuando el nivel de la malla más gruesa de la multigrad es 400 celdas o 512 procesadores con la tolerancia 10⁻⁵ del algoritmo PISO.

Tabla 5-4 Tiempos de simulación hasta 10000 pasos temporales

Número de núcleos	Horas para 10000 pasos	Ratio respecto a 1 procesador
16	123844	1.
32	57040.9	2.17
64	26237	4.72
128	18373	6.74
256	18293	6.77

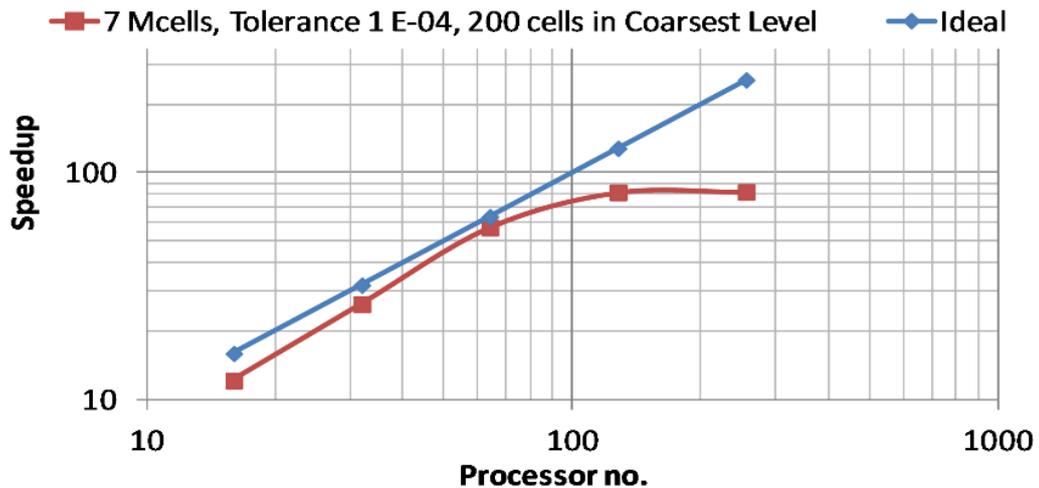


Figura 5-3 Escalabilidad en función del número de procesadores

La escalabilidad se define como el tiempo usando un procesador frente al tiempo usando N procesadores para una simulación de 7 millones de celdas con LES. El número óptimo de procesadores es 64 para 200 celdas en el nivel de la malla más gruesa de la multigrid con una tolerancia de 10^{-4} del algoritmo PISO.

La optimización se lleva a cabo mientras se realizan simulaciones sin proceso de muestreo. El muestreo requiere la generación de muchos archivos, y el proceso de escritura es el cuello de botella en el control del procesado en paralelo.

Se encontró que para la malla de 7 ó 9 millones de celdas sin multigrid, el óptimo es de 64 procesadores. Si el multigrid establecido se modifica para tener en cuenta más celdas en el nivel más grueso de la malla, el número óptimo de procesadores se puede aumentar a 128. Además, el aumento de la tolerancia tiene un impacto para el uso eficiente de mayor número de procesadores.

Un modelo puede tener 300 Gb de datos, pero 200 Gb son muestras de los análisis de POD. Después de la compresión, los archivos de una simulación ocupan alrededor de 30 Gb. La toma de muestras se obtuvo en la última etapa de la simulación, después de que se lograra la convergencia completa por lo que posteriormente se obtiene el campo promedio de flujo. Eso significa que los archivos de salida se generan durante períodos muy cortos de tiempo con referencia a todo el proceso.

5.7 Análisis explícito e implícito

5.7.1 Análisis explícito. Modelo de Smagorinsky

En este apartado se simulan los casos L2 y L3 (Tabla 5-2) con OpenFOAM y Ansys Fluent respectivamente con 10 millones de celdas y modelo explícito de Smagorinsky y números de swirl de 0.45 y 1.1 respectivamente.

La Figura 5-4 muestra los contornos de velocidad axial y las líneas de corriente en un plano dentro de la cámara de ensayo para el modelo Smagorinsky simulado con OpenFOAM. Las líneas de corriente están proyectadas en el plano. No se considera la componente tangencial de rotación.

El análisis de los campos de velocidad instantáneos (Figura 5-4, superior) pone de manifiesto la dificultad de predecir los patrones de flujo a través de éstos. Además, las líneas de corriente pueden ser poco comprensibles. En la (Figura 5-4, inferior) se observan los contornos de velocidad axial y las líneas de corriente para resultados promediados en el tiempo una vez que la simulación ha convergido.

En la Figura 5-4 (parte inferior), la zona de recirculación interior (IRZ) se produce debido a la alta rotación del chorro, y tiene flujo reverso con estructuras axilsimétricas en forma de bulbo de forma análoga a lo comentado en Young et al. (1999).

La recirculación exterior (ORZ) se debe a la expansión brusca. La capa de cortadura está confinada entre ambas zonas de recirculación donde se produce la mezcla. Se aprecia que la IRZ tiene flujo reverso y está limitado por dos puntos de

remanso en el eje de la cámara con dimensión longitudinal adimensional (L_{IRZ}/D) de 1.3. Además se determina por la distancia entre estos puntos de remanso que su diámetro adimensional (D_{IRZ}/D) es 0.84. Los centros de los vórtices se encuentran en 0.47 (X_{CRZ}/D) de la entrada de la cámara.

Se tiene flujo reverso con velocidades medias negativas, pero las velocidades instantáneas pueden llegar a ser positivas.

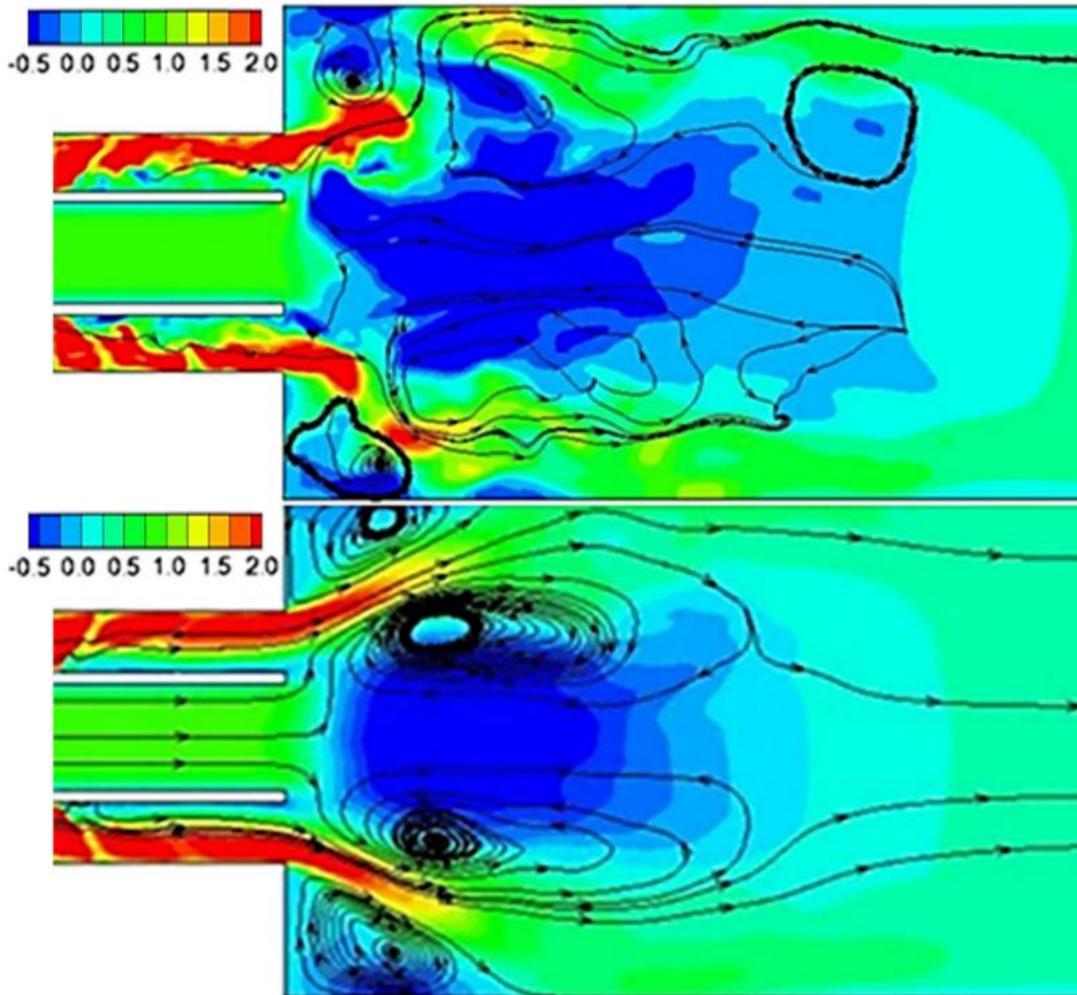


Figura 5-4 Contornos de velocidad (m/s) y líneas de corriente para flujo instantáneo (sup.) promediado (inf.) OpenFOAM. Swirl=1.1

Un análisis LES con Ansys Fluent con el modelo Smagorinsky y número de swirl mayor (1.1) fue llevado a cabo. Se compararon los resultados instantáneos de dicho modelo frente a los resultados estacionarios de un modelo RANS con número de swirl similar.

La Figura 5-5 muestra la comparación de la velocidad axial en dichos modelos. En la mitad superior se muestra el flujo instantáneo resuelto con LES, mientras que en la mitad inferior se muestra el flujo medio resuelto con RANS. El caso RANS empleado es el M48 que tiene número de swirl 1.2. Es posible apreciar la diferencia de escalas de resolución entre modelos RANS y LES.

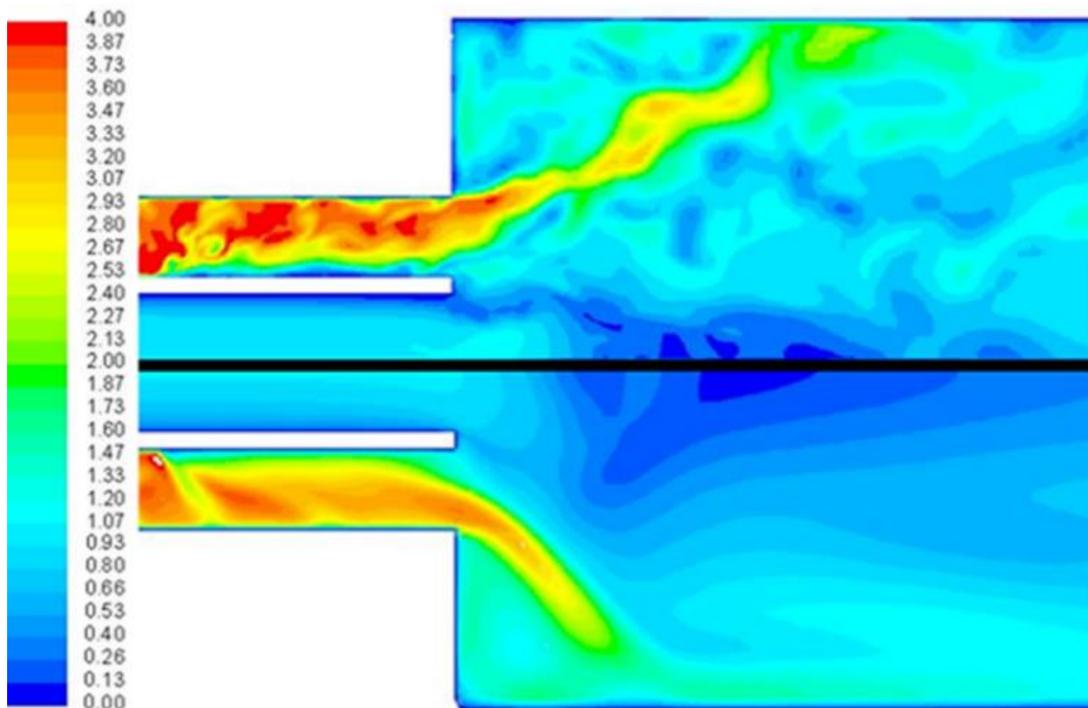


Figura 5-5 Contornos de velocidad axial (m/s). LES (mitad sup.) Swirl=1.1 y RANS (mitad inf.) Swirl=1.2 FLUENT.

5.7.2 Análisis implícito. Scale Selective Discretization. Validación

Los modelos implícitos LES o ILES no consideran modelo subgrid, por lo que eliminan el coste computacional de calcular este término. Además el ancho de filtro está relacionado con la resolución espacial local, lo que facilita la determinación de una malla óptima. Por el contrario pueden existir problemas con el error de truncación. La combinación de ILES con SSD puede mejorar la disipación numérica asociada a los esquemas upwind.

Se busca demostrar que modelos ILES con SSD son capaces de predecir los flujos rotantes con precisión.

En este apartado se simulan los casos L4 y L5 (Tabla 5-2) con OpenFOAM de 10 millones de celdas, que emplean el modelo ILES e ILES SSD respectivamente. Este análisis emplea número de swirl de 0.45 para poder comparar los resultados frente a los experimentales de Roback et al. (1983).

Previamente a la validación se muestran los contornos de velocidad y líneas de corriente del flujo instantáneo y el flujo promediado en el tiempo, para ilustrar las principales características del flujo.

Una nueva estructura del flujo es descubierta gracias al análisis LES. Un nuevo y pequeño vórtice contrarrotante aparece dentro de la ORZ (Figura 5-6). Esta estructura es análoga a la existente en el fenómeno de inestabilidades de Taylor-Couette en el que se inducen vórtices toroidales cuando existe flujo entre cilindros concéntricos girando a distinta velocidad angular.

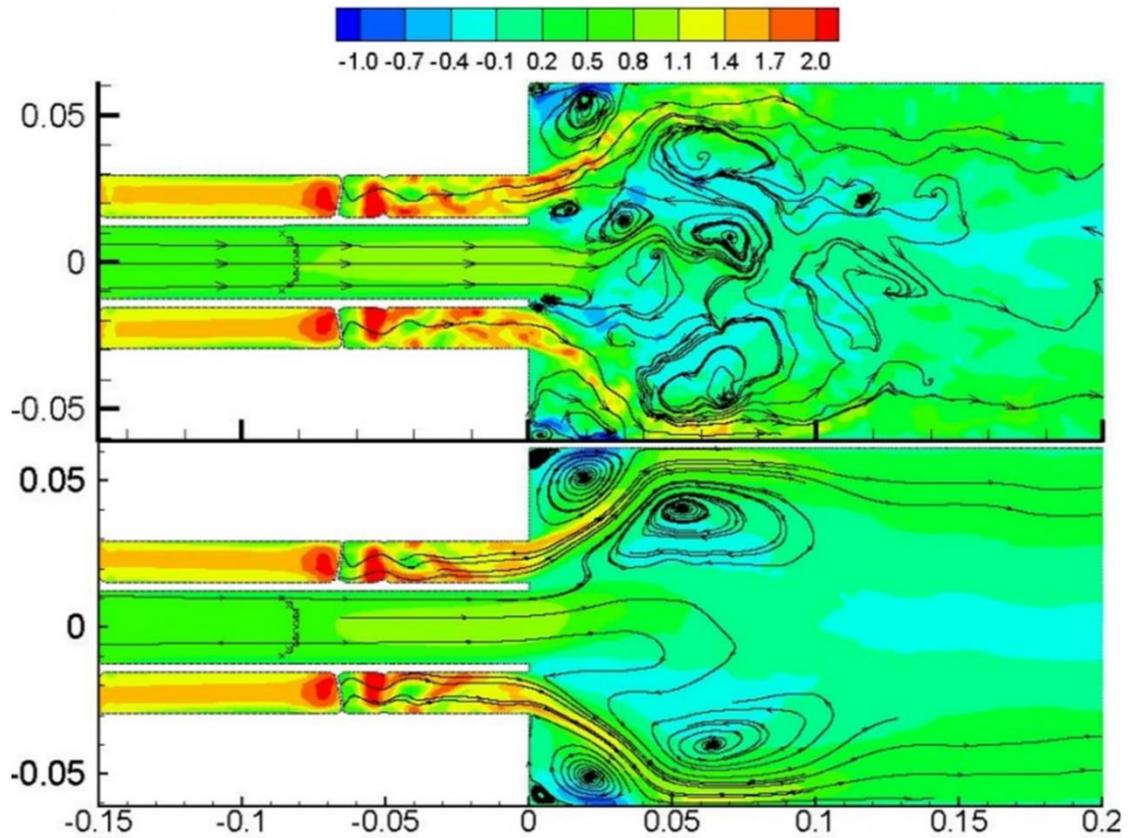


Figura 5-6 Contorno de velocidad axial y línea de corriente en el corte longitudinal. Flujo instantáneo (sup.) Flujo promedio (inf.)

En este caso no existen cilindros girando, pero el chorro de la tobera exterior tiene una importante rotación, mientras que el de la tobera central no y la pared se encuentra fija, por lo que existe movimiento relativo entre ellos y es por lo que se producen torbellinos contrarrotantes. Es importante notar que esta estructura es solo posible de determinar mediante análisis LES, ya que se resuelven escalas más pequeñas que en RANS. Otra pequeña capa de cortadura aparece entre ambos vórtices.

En resumen se tienen tres vórtices contrarrotantes, correspondientes a tres zonas de recirculación. La primera es la IRZ situada en la parte interior y con forma de bulbo, la segunda es la ORZ situada en la parte exterior con forma de toro y la tercera se asocia al nuevo vórtice con forma de toro, que se sitúa entre la ORZ y la pared de la cámara de ensayo.

Con el objeto de analizar la bondad de la discretización de escalas selectivas (SSD) se comparan los contornos de velocidad obtenidos en un análisis ILES estándar y un análisis ILES con dicha discretización. En la Figura 5-7 se muestran los contornos de velocidad media, fluctuante y de la varianza de la velocidad de ambos casos.

Los contornos de velocidad media (Figura 5-7, A y B) muestran que la apertura del choro es similar en ambos modelos aunque la velocidad es más alta cerca de las paredes con modelos SSD. Los contornos de velocidad fluctuante (Figura 5-7, A y B)

dan una idea de la forma de la capa de cortadura. Los contornos de varianza de la velocidad (Figura 5-7, E y F) muestran cómo son la generación de energía cinética turbulenta y las escalas intermedias resueltas o torbellinos. Se encuentra que el modelo que emplea SSD es capaz de extraer más energía al flujo.

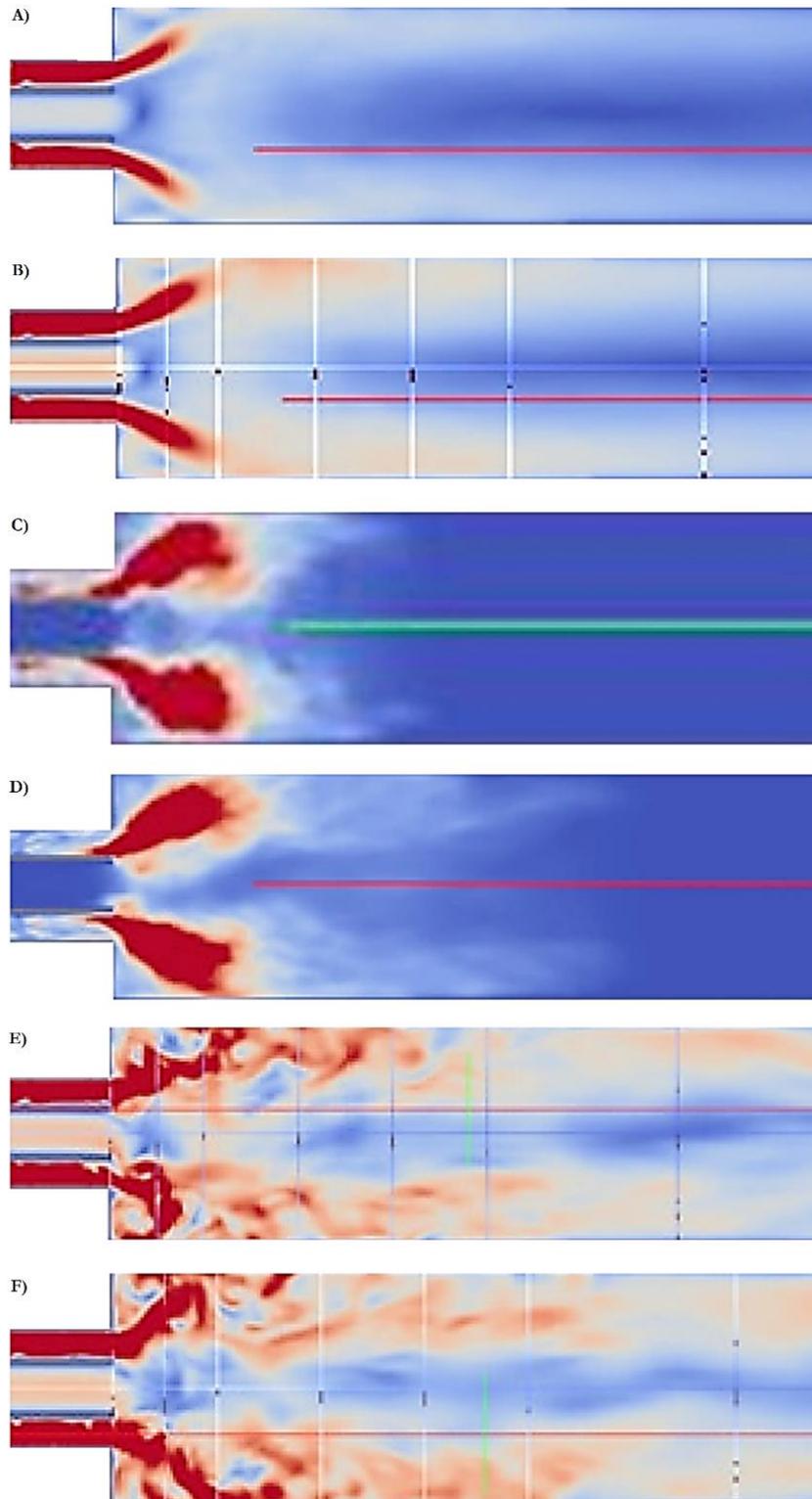


Figura 5-7 Contornos de velocidad media (A y B) de velocidad fluctuante (C y D) y de varianza de la velocidad (E y F) A, C y E corresponden a modelos ILES mientras que B, D y F corresponden a ILES-SSD

Una vez descrito el flujo mediante ILES SSD se comparan los resultados obtenidos frente a los experimentales. En la Figura 5-8, Figura 5-9 y Figura 5-10 se contrastan los perfiles de velocidad promediados (v_z , v_y y v_x respectivamente) en diferentes secciones axiales con 10.3 millones de celdas frente a los resultados experimentales proporcionados por (Roback et al. 1983) para el flujo isoterma.

Los perfiles de velocidad axial (Figura 5-8) no son perfectamente simétricos debido al carácter transitorio del flujo y esto se aprecia tanto en los resultados numéricos como en los experimentales.

Las velocidades axiales se pueden relacionar con el tamaño de la IRZ. Los cortes con el eje de abscisas indican el tamaño de ésta. La estimación numérica de la IRZ es buena aunque el modelo numérico tiende a sobreestimarla. En la sección $z=1.64D$ se aprecia cómo sigue existiendo IRZ en el modelo numérico mientras que en el experimental no. Las velocidades máximas son estimadas adecuadamente en posiciones axiales pequeñas, aunque en posiciones axiales intermedias existen diferencias. Los resultados experimentales indican mayores velocidades máximas que los numéricos.

Las tendencias de las velocidades axiales son bien predichas, aunque no es posible evaluar los resultados cerca de la pared ya que no se proporcionan valores experimentales. Por este motivo es imposible validar tamaño de la ORZ.

Existen diferencias de v_x entre los resultados numéricos y experimentales (Figura 5-9). En posiciones axiales grandes las velocidades son casi nulas, lo que dificulta la validación. En todas las secciones las tendencias se reproducen de forma adecuada.

En referencia a v_y (Figura 5-10) se tiene un ajuste ligeramente superior a los de v_x . Para posiciones axiales altas las curvas son casi coincidentes mientras que para posiciones axiales pequeñas, las velocidades máximas no son bien estimadas, aunque sí lo son las tendencias.

Se ha demostrado que modelos ILES con SSD son capaces de simular los flujos rotantes con precisión y además han mostrado la existencia de un nuevo y pequeño vórtice contrarrotante en el flujo situado entre la ORZ y la pared.

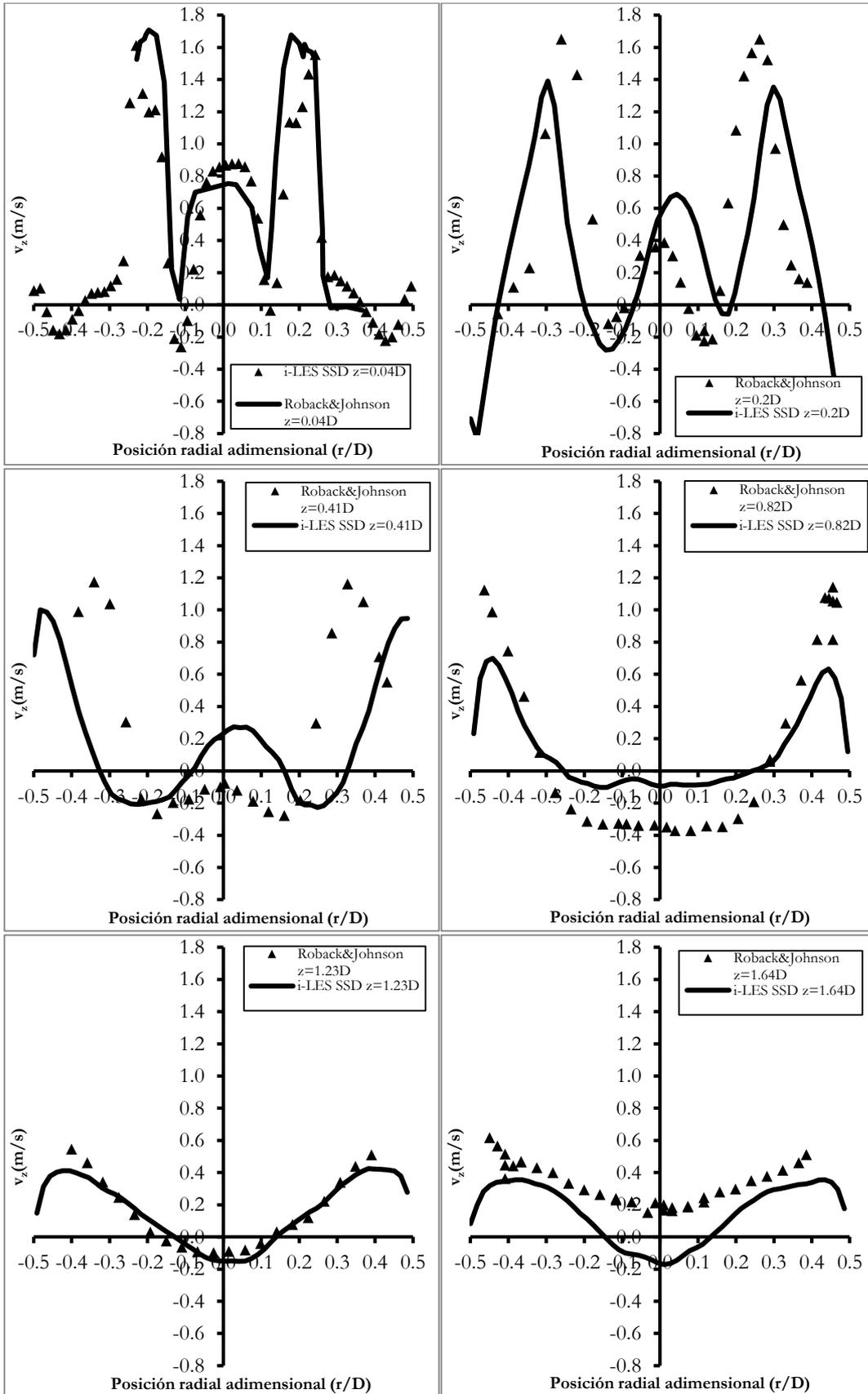


Figura 5-8 Perfil de velocidad axial promediada para distancias axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 1.23D. Resultados experimentales (Roback et al. 1983)

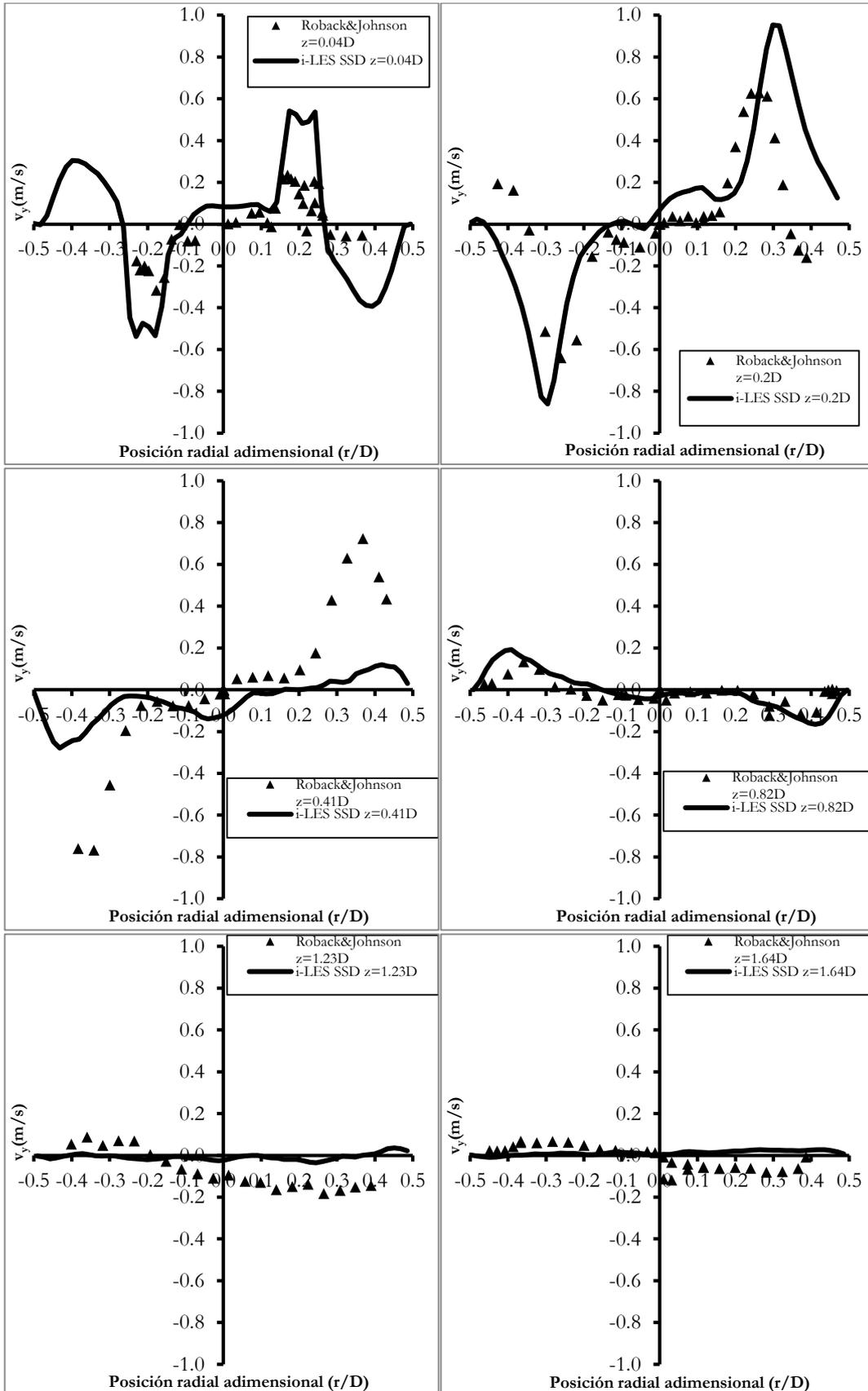


Figura 5-9 Perfil de velocidad radial promediada para distancias axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 1.23D. Resultados experimentales (Roback et al. 1983)

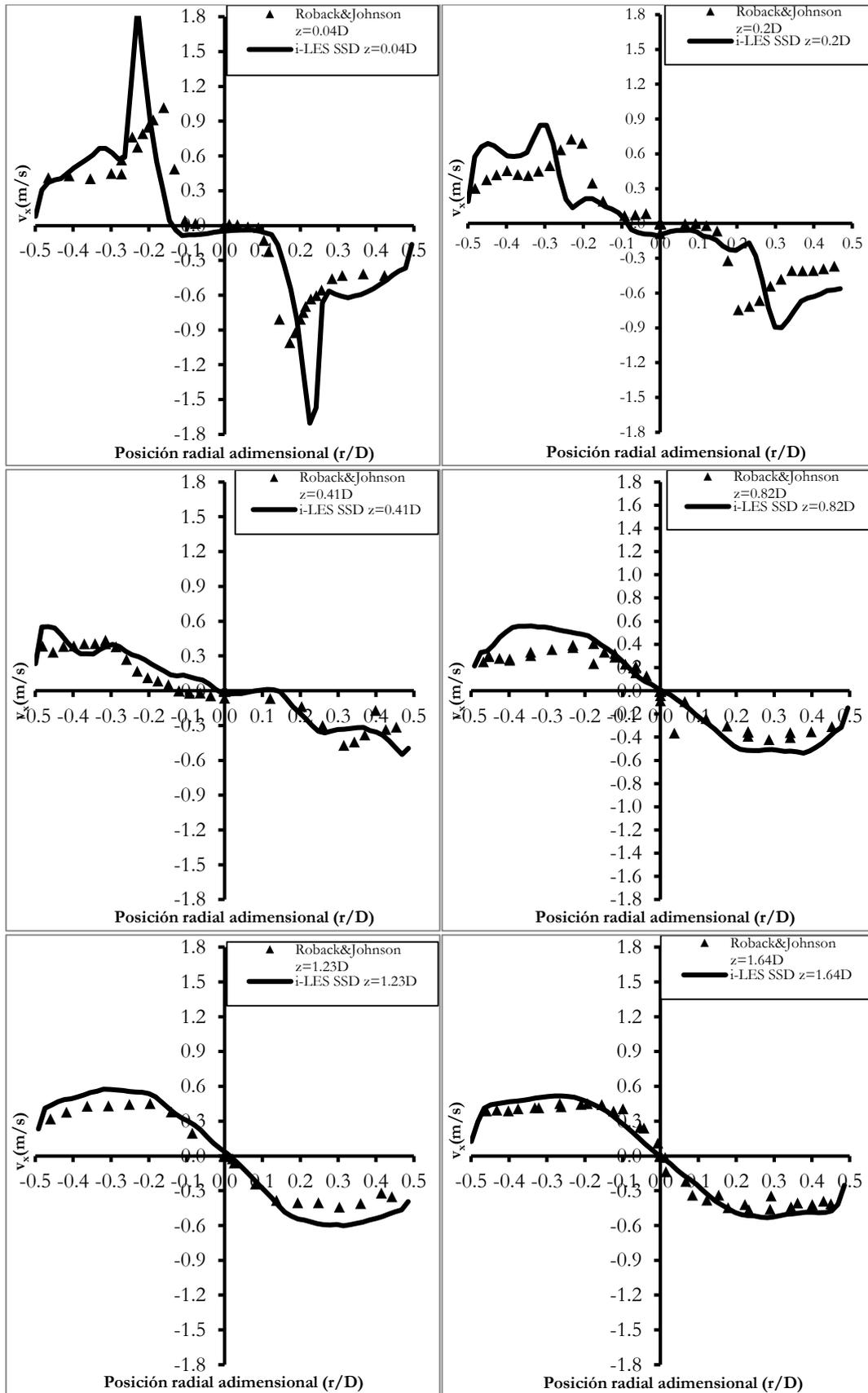


Figura 5-10 Perfil de velocidad tangenciales promediada para distancias axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 1.23D. Resultados experimentales (Roback et al. 1983)

5.8 Influencia del número de swirl

Una vez demostrado que el modelo ILES SSD es adecuado y proporciona buenos resultados se emplea éste para analizar la influencia del número de swirl. En este apartado se simulan los casos L6 y L7 (Tabla 5-2) con OpenFOAM, que emplean el modelo ILES SSD con números de swirl de 0.6 y 1.2 respectivamente y de 10 millones de celdas.

Se puede apreciar en la Figura 5-11 el patrón de flujo promediado en el tiempo para número de swirl 0.6 y 1.2 respectivamente.

No se muestran el patrón de flujo instantáneo puesto que es complejo extraer conclusiones de éste. El aumento del número de swirl incrementa la IRZ. La ORZ y la IRZ se mueven aguas arriba.

También se produce para $S=0.6$ el pequeño vórtice contrarrotante similar al de las inestabilidades de Taylor-Couette. Se puede concluir que dicho vórtice está asociado a números de swirl bajos y medios, ya que al aumentar el número de swirl la ORZ se mueve hacia la pared y se fusiona con el pequeño vórtice. También se aprecia en la Figura 5-11 el aumento del ángulo de apertura del chorro con el aumento del número de swirl. Asimismo se aprecia que la capa de cortadura es más compacta para altos número de swirl.

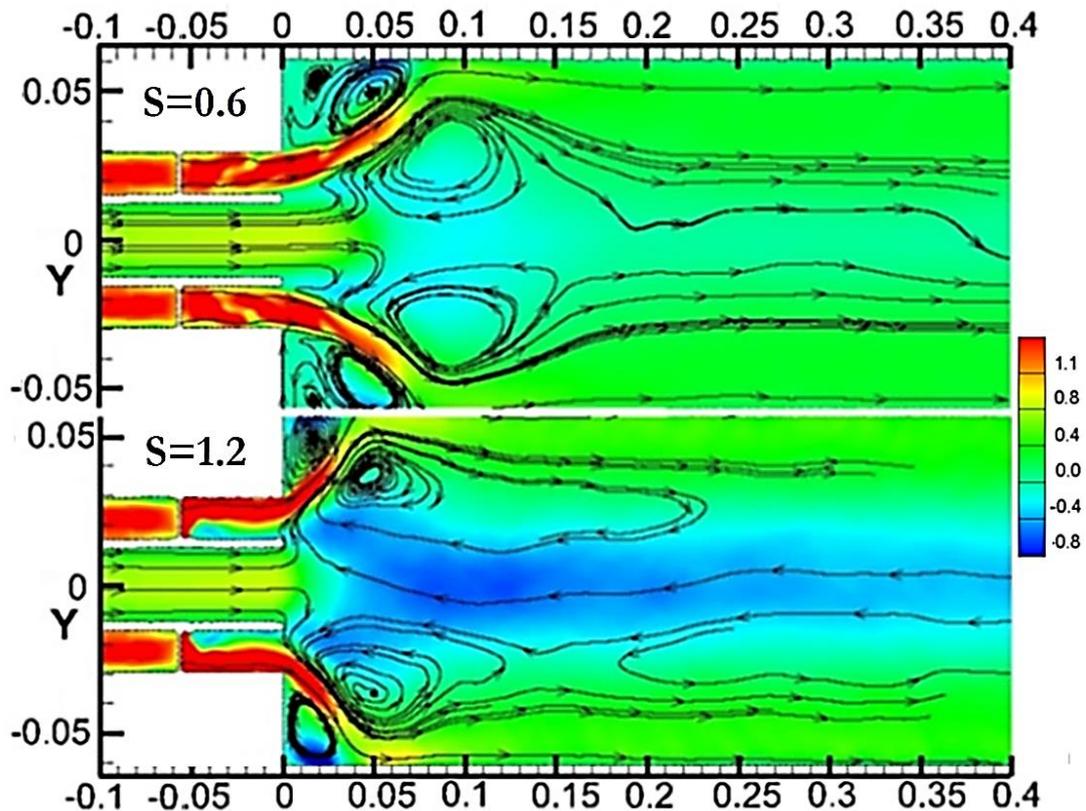


Figura 5-11 Patrón de flujo promediado en el tiempo para número de swirl 0.6 (sup.) y 1.2 (inf.)

5.9 Estructuras de vórtices

En caso de emplear campos de presión o vorticidad, es complicado visualizar torbellinos con LES, porque hay un amplio rango de variación y porque es difícil localizar los mínimos valores de presión o máxima vorticidad. Para solucionar eso se suelen emplear criterios alternativos que suelen ilustrar las estructuras más energéticas del flujo 3D y permiten determinar de forma clara el núcleo de los vórtices.

En este apartado se simulan los casos L2 y L7 (Tabla 5-2) con OpenFOAM de 10 millones de celdas que emplean el modelo Smagorinsky e ILES SSD.

La selección del método especifica conjuntos de ecuaciones que permiten detectar los vórtices como regiones espaciales (Tabla 5-5). En Haller (2005) y Roth (1998) se describen algunos métodos para detectar vórtices.

Tabla 5-5 Métodos para detectar los vórtices

Método	Descripción
Absolute Helicity	Valor absoluto del producto escalar de vectores velocidad y el vector vorticidad.
Real Eigen Helicity	Producto escalar de la vorticidad y vector rotación.
Eigen Helicity	Producto escalar de la vorticidad y la normal del plano de rotación (plano abarcado por las partes real e imaginaria de vectores propios complejos del tensor gradiente de velocidad).
λ_2	Valores negativos del segundo valor propio intermedio del tensor $S^2 + \Omega^2$ (calculado a partir de la parte de deformación y rotación del tensor gradiente de velocidad).
Q-Criterion	Segunda invariante del tensor de gradiente de velocidad. Para una región con valores positivos $\Omega^2 - S^2$ existe rotación dominante
Swirling Discriminant	Discriminante de tensor gradiente de velocidad de valores propios complejos. Los valores positivos indican la existencia de patrón de flujo local de rotación.
Swirling Strength	Parte imaginaria de valores propios complejos de tensor gradiente de velocidad. Es positivo si y sólo si el discriminante es positiva y su valor representa la intensidad de rotación alrededor de los centros locales.
Vorticity	Rotacional del vector velocidad.

Con el objeto de mostrar una visualización más clara de las estructuras de vórtices del flujo y poder caracterizarlo mejor, se han aplicado los criterios de localización de vórtices más empleados ($Q > 0$ y $\lambda_2 < 0$) siendo Q descrito en la ecuación 5-9 y S_{ij} y Ω_{ij} definidos en 5-10.

$$Q = - \frac{1}{2} (S_{ij}S_{ij} - \Omega_{ij}\Omega_{ij}) \tag{5-9}$$

$$S_{ij} = 0.5 \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad \Omega_{ij} = 0.5 \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad 5-10$$

Aplicando los conceptos indicados anteriormente se representan los contornos e iso-superficies de λ_2 y Q constantes para visualizar la estructura del flujo y el núcleo los vórtices. Se aplican dichas técnicas sobre los modelos LES de Smagorinsky (L2) y ILES SSD (L7). La Figura 5-12 muestra las iso-superficies de λ_2 constante dentro de la cámara de ensayo para el modelo LES explícito Smagorinsky (Caso L2). Los contornos de $\lambda_2 < 0$ y $Q > 0$ así como las iso-superficies de Q constante se muestran en la Figura 5-13 y en la Figura 5-14 para el modelo ILES SSD (Caso L7).

El modelo ILES SSD muestra de forma más clara el núcleo de los vórtices que el modelo de Smagorinsky. En la Figura 5-13 se observa que se forman vórtices en el generador de swirl como consecuencia del desprendimiento de capa límite.

En la Figura 5-14 se observa que las estructuras de vórtices se hacen más pequeñas a medida que aumenta la posición axial, lo podría ser un indicio de la transferencia de energía de las grandes escalas a las intermedias.

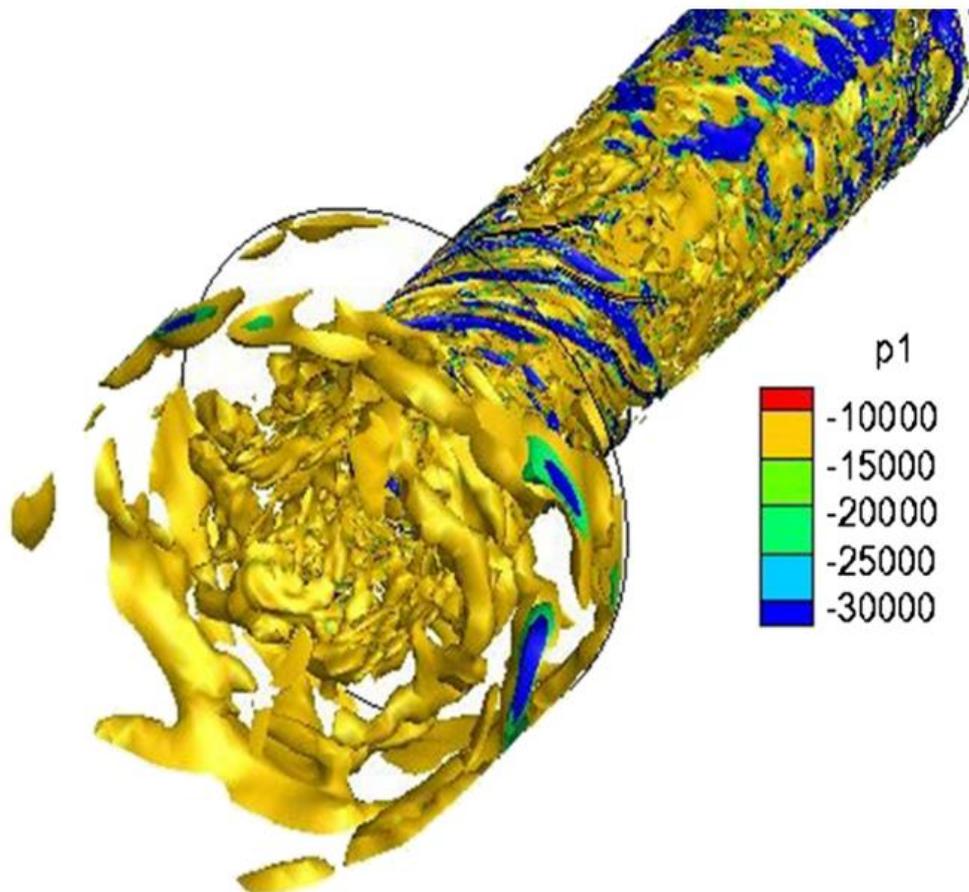


Figura 5-12 Iso-superficies de λ_2 dentro de la cámara de ensayo representando el núcleo de los vórtices. Modelo LES explícito Smagorinsky. Caso L2.

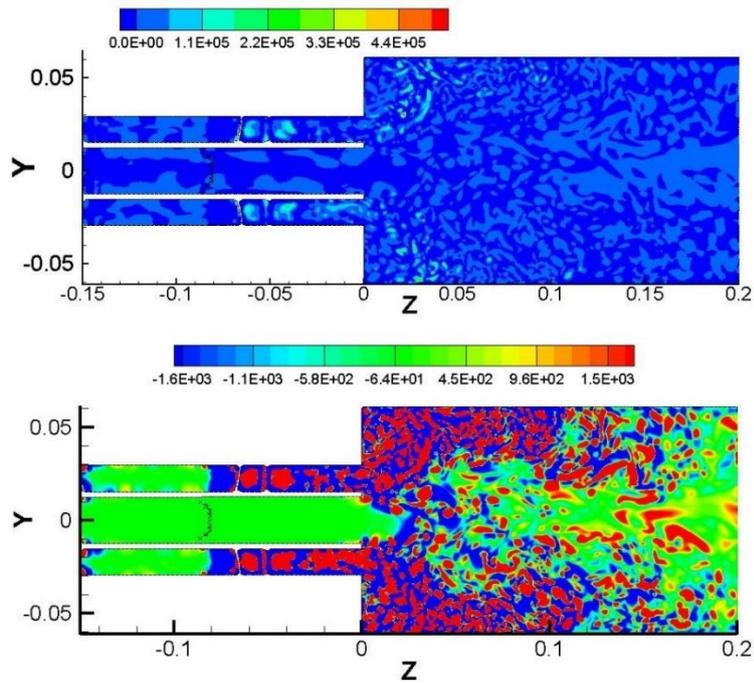


Figura 5-13 Contornos de $\lambda_2 < 0$ (inferior) y $Q > 0$ (superior). Modelo ILES SSD. Caso L7

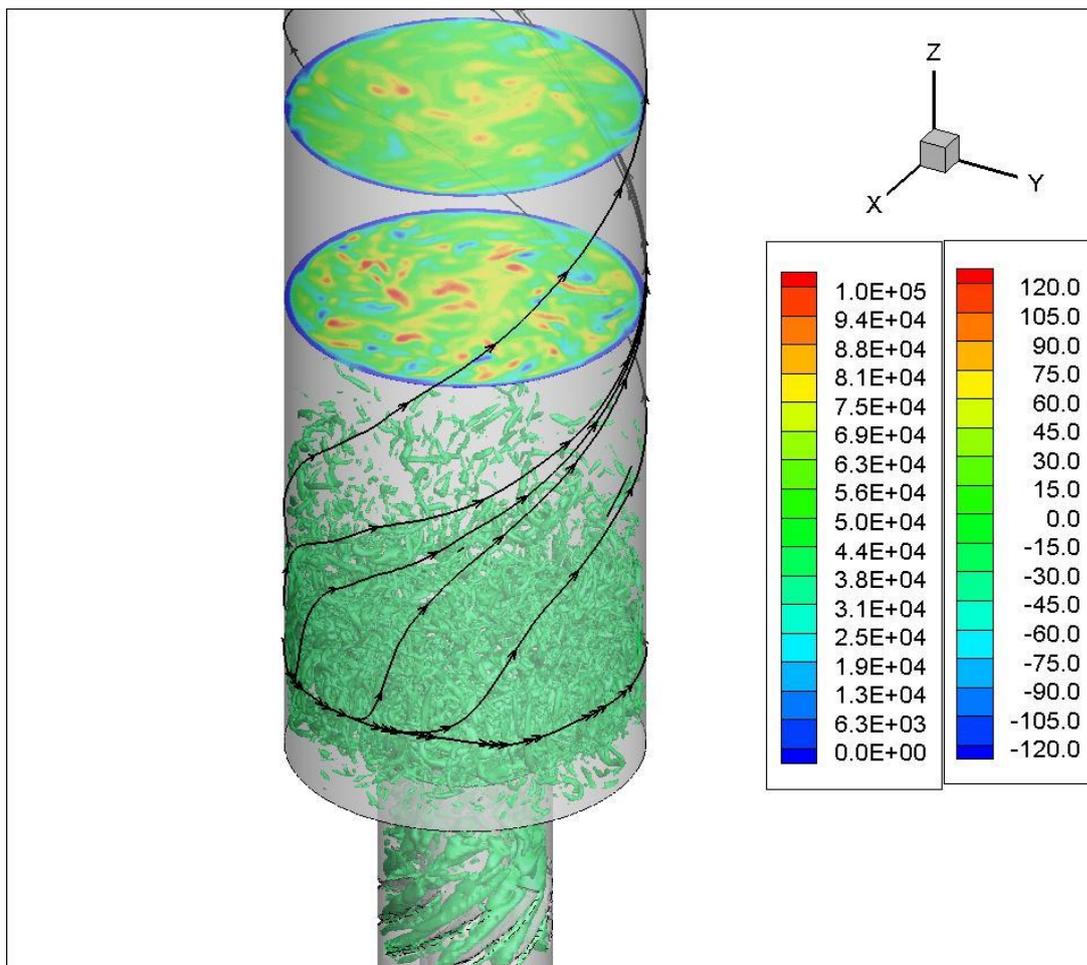


Figura 5-14 Iso-superficies de $Q=30000$ para representar el núcleo de los vórtices. Secciones axiales $0.14D$ y $0.2D$ con vorticidad axial desde -120 a 120 s^{-1} . En el exterior se muestran las líneas de corriente. Modelo ILES SSD. Caso L7

5.10 Espectro de la energía turbulenta

El espectro de energía $E(\kappa)$ es la energía contenida en torbellinos de tamaño e y número de onda κ como se indicaba en el capítulo 2. En el apartado 3.1.2.1 se describieron de forma teórica las escalas de la turbulencia y el espectro de energía. Se mostró el espectro de energía teórico como una función del número de onda en los sub-rangos de producción, de inercia y de disipación (Figura 3-3). Si se analiza se puede obtener información sobre los rangos y escalas características.

En este apartado se estudia el espectro y la transferencia de la energía entre las distintas escalas, para comprobar si las simulaciones LES son adecuadas.

La determinación del espectro de energía requiere mediciones simultáneas de fluctuaciones de la velocidad en diferentes puntos. La hipótesis de Taylor de turbulencia congelada descrita en Pope (2010), permite aplicar el muestreo sobre una componente de la velocidad en un punto durante un cierto período de tiempo y luego convertir la señal de tiempo a una señal espacial utilizando $x = Ut$ siendo U el promedio de velocidad. Sólo es válido para $u'/U \ll 1$, lo cual no es siempre el caso.

Se sitúan unas sondas o puntos que registran una variable en cada paso temporal y se comprueba cómo es la decadencia de la energía turbulenta, es decir, la transferencia de energía turbulenta. En Pope 2010 se realiza una descripción exhaustiva de estos conceptos.

Un análisis mediante la transformada rápida de Fourier (FFT) del muestreo puede facilitar el análisis, permitiendo expresar la distribución de energía de los torbellinos del sistema de forma más cómoda, en términos de su espectro.

En este apartado se postprocesan los casos anteriormente analizados L2 y L3 (Tabla 5-2) con Ansys Fluent y OpenFOAM respectivamente, que emplean el modelo explícito de Smagorinsky y números de swirl de 0.45 y 1.1 y de 10 millones de celdas.

- OpenFOAM

Se sitúa una sonda en la región de turbulencia libre en el punto (0.12, 0, 0.16)D y se registran 20000 muestras con un paso de tiempo de $5 \cdot 10^{-5}$ s.

Si se realiza un análisis del espectro de energía, realizando una FFT al registro de energía cinética turbulenta en las sondas localizadas en la zona de turbulencia libre y se representa en escala logarítmica, se obtiene la línea azul de la Figura 5-15. Para un número de Reynolds basado en la turbulencia, $Re_L = k^2 \varepsilon^{-1} \nu^{-1} \cong 2400$ equivalente a número de Reynolds basado en escala Taylor de $Re_\lambda = (20 Re_L / 3)^{1/2} \cong 125$ se obtiene el espectro de energía teórica, que indica la línea roja de la Figura 5-15.

El análisis permite concluir que la resolución de la malla y las características del modelo numérico son aceptables, puesto que se consigue capturar la pendiente $-5/3$ de la gama inercial (línea verde de la Figura 5-15). No está clara la asociación de la pendiente 2 de la energía que contienen las macroescalas con la producción de turbulencia.

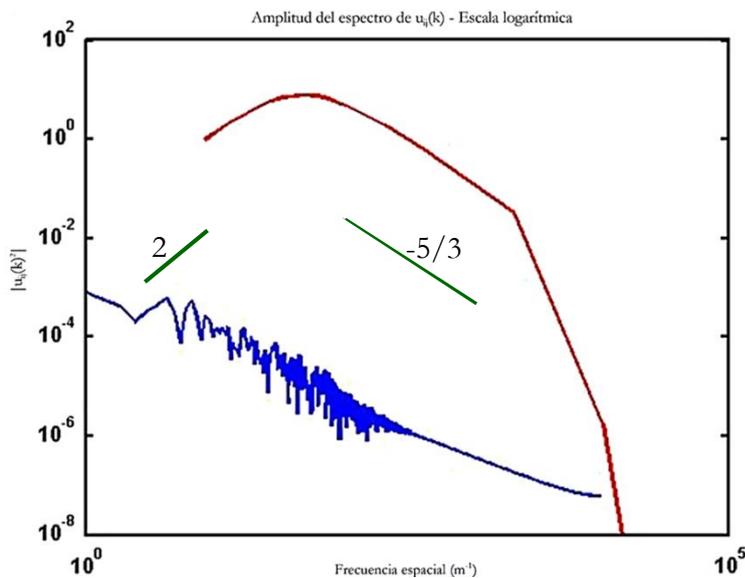


Figura 5-15 Decaimiento de energía [m^2/s^2] en función del número de onda [m^{-1}] de una sonda a (0.12, 0, 0.16)D. Modelo Smagorinsky OpenFOAM

- Ansys Fluent

Se realiza un análisis similar para el modelo realizado con Ansys Fluent, registrando la energía cinética turbulenta en una matriz de 12 puntos a 0.025 m del centro del eje y a una distancia de 0.01 de la entrada de la cámara de combustión, es decir, en la zona en la que más turbulencia se produce. El registro de los 12 puntos es similar por lo que, se elige uno cualquiera.

Se puede apreciar en la Figura 5-16 como el tamaño de la malla es suficiente para capturar la pendiente de $-5/3$ de escala inercial y la pendiente de 2 de la macroescala.

Así pues se concluye que la simulación mediante Large Eddy Simulation con Ansys Fluent representa de forma fiel la transición entre las distintas escalas de la turbulencia.

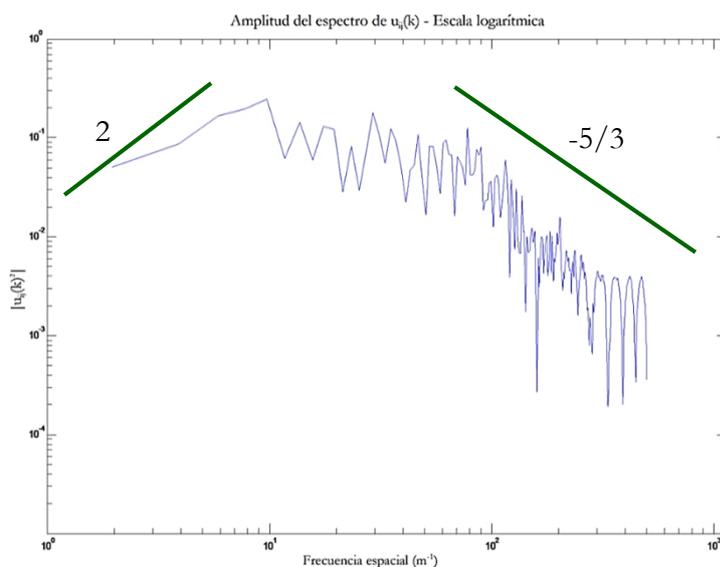


Figura 5-16 Decaimiento de energía [m^2/s^2] en función del número de onda [m^{-1}]. Modelo Smagorinsky Ansys Fluent

5.11 Proper Orthogonal Decomposition (POD)

El POD, también conocido como en otras disciplinas como análisis de los componentes principales, es una potente herramienta de postproceso de una enorme cantidad de datos ya que el procedimiento permite identificar patrones y marcar diferencias en el comportamiento del campo fluido. Además, una vez identificados los patrones, se puede reducir considerablemente la cantidad de datos necesarios para reconstruir todo el campo fluido con una mínima pérdida de información.

Es una herramienta poderosa para el análisis de datos, ya que permite identificar patrones en los datos, y expresar los datos de una manera que pone de relieve sus similitudes y diferencias según se indica en Yu et al. (2013) y Duwig et al. (2007).

El POD es un método que es usado en resultados experimentales y numéricos para reducir los datos necesarios, sin pérdida de información, con el objeto de extraer las principales características del flujo turbulento caracterizados por contener un amplio rango de escalas debido a los torbellinos de diferentes tamaños.

El método puede ser utilizado para extraer estructuras coherentes, a partir de datos de espacio-tiempo. Los datos se descomponen en un conjunto de modos empíricos, funciones propias ortogonales entre sí, o POD. Los modos POD son puramente correlaciones espaciales, sin ninguna dependencia con el tiempo.

Los modos giratorios son las inestabilidades que se observan comúnmente en las corrientes con rotación. Tales modos pueden aparecer tanto en condiciones isoterma ya que son esencialmente hidrodinámicos y corresponden con el PVC (precesión centro del vórtice) observado en muchos flujos rotantes, como en condiciones reactivas donde la estructura rotante observada dentro de la cámara de combustión podría ser no hidrodinámica y tener cierta componente acústica.

Los modos acústicos transversales de una cámara de combustión crean un movimiento de rotación de la llama que conduce a un modo que tiene las características de un PVC clásico aunque la fuente sea acústica y no hidrodinámica.

Las fluctuaciones acústicas producen oscilaciones de las paredes de la cámara de combustión. El fenómeno es extremadamente peligroso ya que si las fluctuaciones acústicas del flujo coinciden con una frecuencia de resonancia de la estructura sólida se puede tener un fallo del dispositivo.

5.11.1 Metodología

La forma óptima de representar los resultados, usando el mínimo número de términos que cubren prácticamente la totalidad del campo fluido, es proyectando sobre los vectores propios de la varianza. El método es usado para extraer las características espaciales dominantes, tales como estructuras coherentes en este caso. Los datos de fluctuación de una componente de velocidad $v_i'(x_0, y, z, t)$ son descompuestos en un conjunto de M funciones propias o modos. El campo de v' puede ser reconstruido a posteriori mediante combinación lineal de los modos multiplicados por coeficiente de

amplitud $c_m(t)$. Los modos son correlaciones espaciales independientes del tiempo, mientras que los coeficientes de amplitud son independientes del espacio y simulan la amplitud del modo en función del tiempo. Así la POD de v_i' en M modos se llama v_{iM} y viene dada por

$$v_{iM}(x, y, t) = \sum_{m=1}^M c_m(t) \phi_m(x, y) \quad 5-11$$

Los modos de la POD son elegidos para que la diferencia entre v' y v_{iM} sea la mínima en media. Los valores propios λ_m representan la varianza de la variable v_i' en la dirección del modo propio ϕ_m . Entonces los valores propios son ordenados por su magnitud y el conjunto de los mayores valores contienen los modos más energéticos, correspondientes a las estructuras coherentes ϕ_M del campo de velocidad. La energía total es la suma de todos los valores propios y la fracción de energía k_m representada por el modo ϕ_m viene dada por.

$$k_m = \frac{\lambda_m}{\sum_{i=1}^M \lambda_i} \quad 5-12$$

Se concluye que son necesarias un elevado número de muestras por periodo y número de periodos para capturar los principales fenómenos y tener la certeza de que los modos están jerarquizados correctamente de acuerdo al espectro de energía.

Debido a la rotación, los modos suelen ir acoplados por pares de estructuras de prácticamente la misma energía y frecuencia característica. Por ello se suelen representar juntos los modos 1 y 2, 3 y 4, 5 y 6... El modo 0 es el campo promediado.

A la vista del espectro de energía, se ha decidido limitar el análisis a un número reducido de vectores propios capturando así un elevado porcentaje de la varianza del campo de velocidad. Los coeficientes de reconstrucción para cada punto de la sección transversal son obtenidos de una rutina en Fortran o en Matlab. Los modos son puntos de un espacio de tantas dimensiones como vectores propios considerados pero pueden visualizarse proyectando los coeficientes de reconstrucción según el vector propio correspondiente.

A continuación se indican los pasos a seguir para implementar el método POD:

1. Conseguir tantas muestras N por ciclo y tantos periodos como sea posible de una sección transversal (contornos 2D de $N_x * N_y$ puntos) de una variable, en este caso la fluctuación de la variable. Por lo tanto, de ahí se obtienen N conjuntos de $3 * N_x * N_y$ valores.
2. En cada punto de la sección transversal, restar la media de cada componente de la velocidad de los valores instantáneos de cada muestra. Así se consiguen las componentes fluctuantes.
3. Calcular la matriz de covarianza, que es una matriz cuadrada $(N * 3 * N_x * N_y) \times (N * 3 * N_x * N_y)$.

4. Calcular los vectores propios y los correspondientes valores propios de la matriz de varianza.
5. Elegir los componentes o modos principales para construir el patrón correspondiente. Los vectores propios con mayores valores propios representan el mayor contenido de energía del campo fluido.
6. Proyectar los contornos 2D sobre los modos principales para formar un nuevo conjunto de datos representativos de las principales estructuras del flujo. Para obtener el modo hay que multiplicar el transpuesto del vector principal por el valor original.

5.11.2 POD en quemadores de flujo rotante

En este apartado se postprocesa el caso L7 (Tabla 5-2) que fue simulado mediante OpenFOAM con 10 millones de celdas, modelo ILES SSD y número de swirl de 1.2. Se selecciona este caso para realizar un análisis POD debido a que tiene alta resolución y ha sido validado en el apartado 5.7.2.

La realización del POD requiere un alto número de muestras por período y un alto número de períodos para la determinación de los fenómenos principales para obtener con exactitud que los modos son acordes al espectro de energía. El análisis POD se realiza sobre una sección significativa (a $z=0.41D$ de la entrada de la cámara de ensayo). Una vez que la convergencia se ha alcanzado se toman 560 muestras cada 2.5 ms.

El espectro de valores propios se trunca en veinte vectores propios, lo que indica que se captura alrededor del 95% de la varianza.

La Figura 5-17 muestra el POD de velocidades en la sección $z=0.41D$. El espectro de valores propios se muestra en la Figura 5-17 (superior izquierda) por lo que, es posible establecer el número de modos con una alta energía. El Modo 0, Figura 5-21 (superior derecha), muestra las líneas de corriente de flujo promedio.

Debido a la naturaleza de turbulencia del flujo, los modos se acoplan por pares de casi igual energía, por lo tanto, el modo 1 y 2 son similares, así como 3 y 4.

Si se realiza otro análisis POD sobre una sección transversal a $z=0.2D$ de la entrada de la cámara de ensayo, se obtiene que solo 6 modos representan el 76% de la energía total. Los cuatro primeros modos se representan en la Figura 5-18 con los vectores de velocidad y contornos de vorticidad axial. Es posible identificar 16 vórtices contrarrotantes en la periferia correspondientes a las 8 aletas del generador de swirl.

El último análisis POD se realiza sobre una sección transversal ($x=0$). La Figura 5-19 muestra los cuatro modos en los vectores de velocidad y contornos de vorticidad axial. Se aprecian las estructuras asociadas a la ORZ y la IRZ.

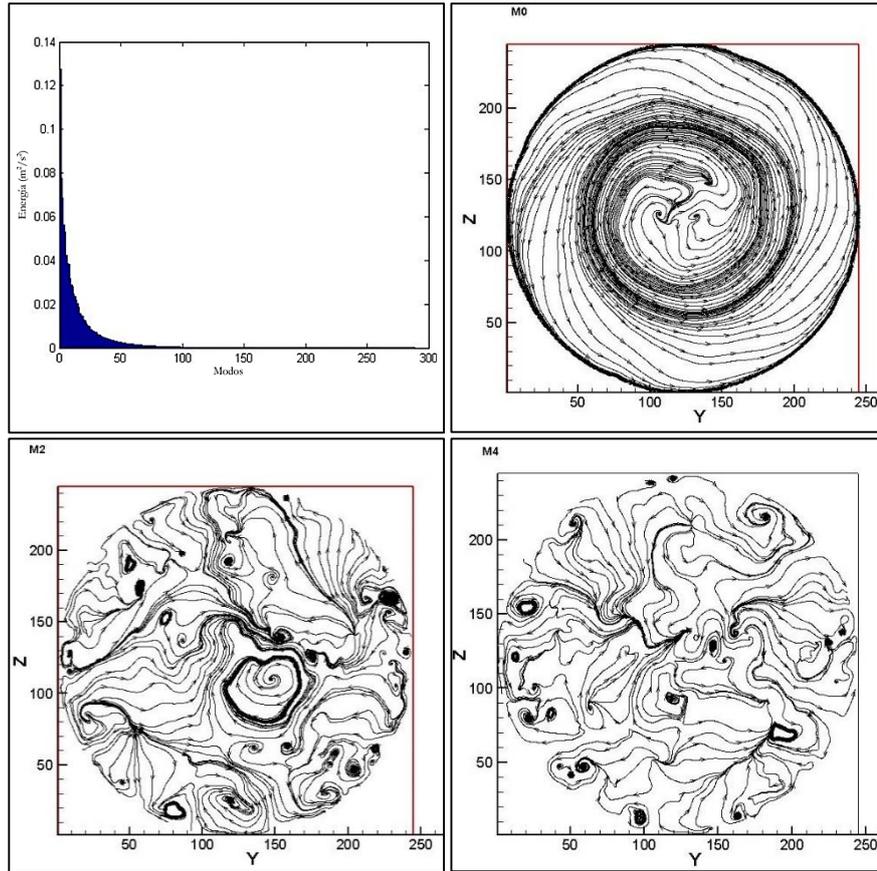


Figura 5-17 POD de velocidades en la sección $z=0.41D$. Distribución energética para cada modo (Arriba, izq.), Modo 0 (Arriba, dcha.), Modos 1-2 (Abajo, izq.) y Modos 3-4 (Abajo, dcha.)

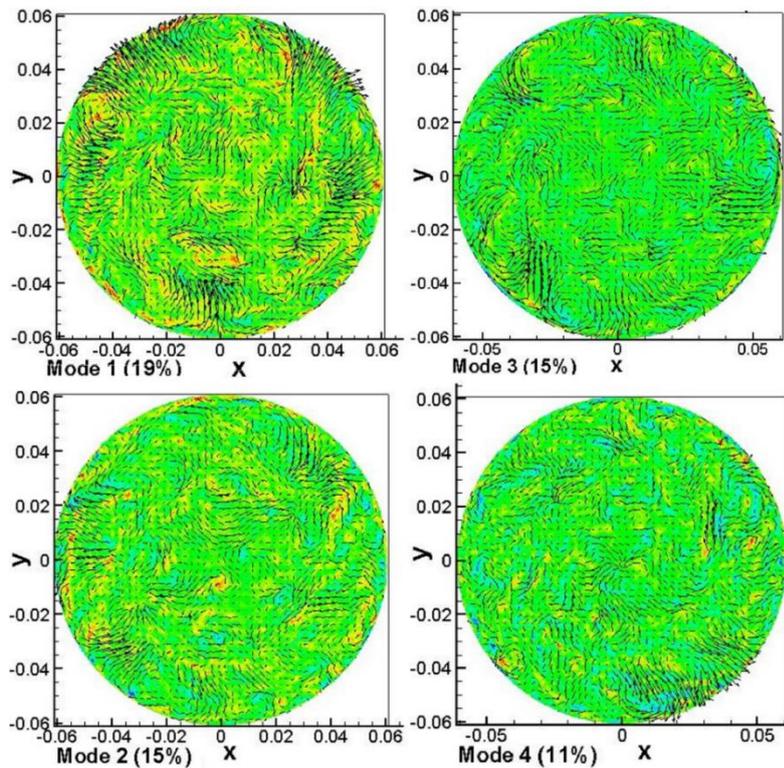


Figura 5-18 POD de velocidades en la sección $z=0.2D$. Vectores de velocidad y contornos de vorticidad axial. Modos 1 a 4.

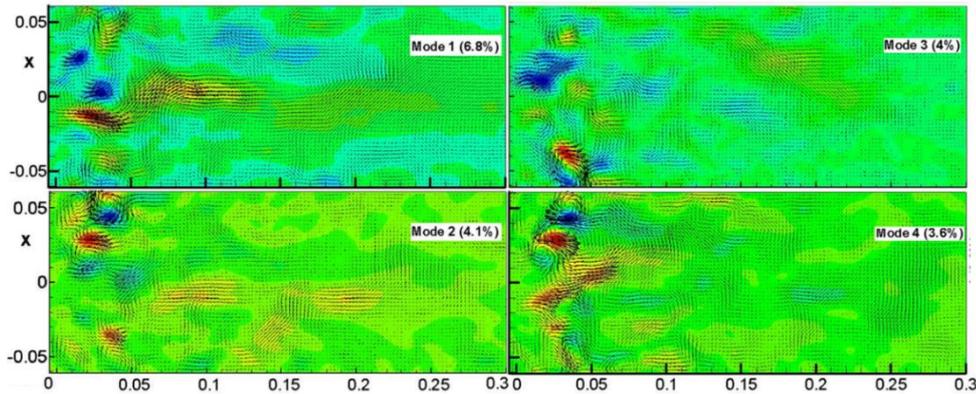


Figura 5-19 POD de velocidades en la sección $x=0$. Vectores de velocidad y contornos de vorticidad axial. Modos 1 a 4.

5.12 Precessing Vortex Core (PVC)

Analizando la IRZ, se puede observar que el flujo no es axilimétrico ya que gira en hélice. Este efecto se denomina PVC o Precessing Vortex Core. La precesión es la tendencia a volver al punto de equilibrio. Suele aparecer en flujos rotantes generando inestabilidades en el flujo.

La aparición del PVC es función del número de swirl y normalmente se da para número de swirl medios y altos ($S > 0.6-0.7$). Otros factores influyentes en el PVC son: el modo de entrada de combustible y la configuración de la cámara de combustión. Algunos autores indican que una entrada de combustible axial puede suprimir la amplitud del PVC (Syred 2006).

El PVC puede ser beneficioso en algunos casos. La eficiencia de la combustión puede verse incrementada con el aumento de la turbulencia y del mezclado.

La gran desventaja del PVC radica en la existencia de resonancia por las oscilaciones acústicas en la cámara de combustión. Ésta puede aumentar los productos de combustión, tales como el CO_2 y el NO_x y generar pulsaciones en la cámara de combustión (Huang, 2009).

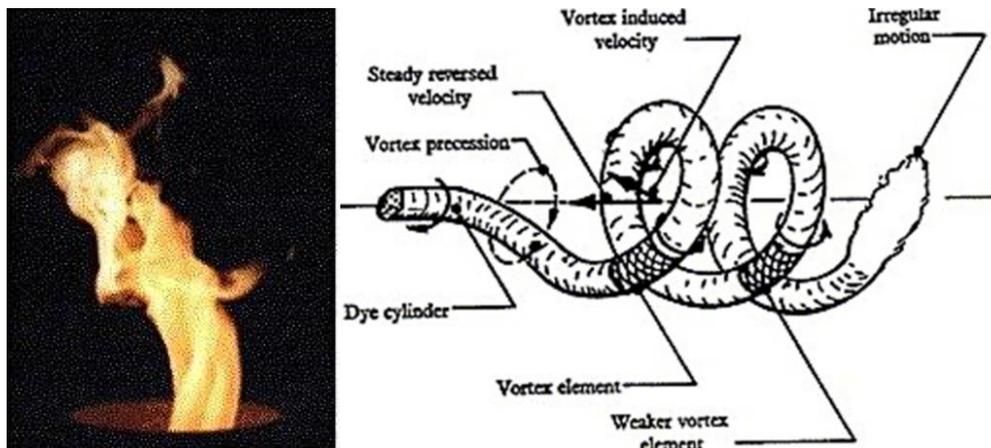


Figura 5-20 Visualización del PVC en combustión premezclada en un quemador de flujo rotante (izq.) Representación esquemática del PVC (Syred 2006).

El análisis transitorio permite identificar que la región de flujo reverso no muestra un comportamiento axial simétrico.

En este apartado se postprocesa el caso L7 (Tabla 5-2) anteriormente analizado con OpenFOAM, 10 millones de celdas, modelo ILES SSD y número de swirl de 1.2.

El centro instantáneo del torbellino con velocidades azimutales no se encuentra en el eje de la cámara. El muestreo temporal indica que el centro del torbellino gira alrededor del eje del dispositivo, lo que se conoce como *Precessing Vortex Core* (PVC).

La Figura 5-21 representa los vectores de velocidad en las secciones transversales situadas a una distancia de la descarga de las toberas de $0.04D$ y $0.4D$. Los contornos se corresponden con la velocidad axial siendo sus valores negativos correspondientes al flujo inverso. El punto negro es el centro geométrico de la cámara de ensayo.

La Figura 5-21 (izq.) muestra una sección muy cerca de la descarga ($0.04D$), por lo que es posible identificar el chorro de la tobera interior cuyo diámetro es de 25 mm, rodeado por el chorro giratorio anular con un diámetro exterior de 59 mm. También es evidente la zona de recirculación externa (ORZ) debido a la expansión brusca.

La Figura 5-21 (dcha.) se corresponde con la sección transversal a 50 mm de la descarga de las toberas ($0.4D$). La zona de recirculación externa ya ha desaparecido, pero aparece una zona de recirculación interna (IRZ). Aparece la evidencia de flujo no axial simétrico por una zona con velocidad axial alta opuesta a la zona de flujo reverso. El centro del vórtice es donde la velocidad azimutal es nula y está situado en la IRZ pero no coincide con el centro geométrico.

La Figura 5-22 muestra cuatro campos de velocidad instantáneos a lo largo de un período del PVC para la sección transversal situada en $1.22D$. Es posible ver el giro del núcleo alrededor del centro geométrico.

Las diferentes trayectorias instantáneas del centro del PVC se representan en la Figura 5-23. Éstas han sido capturadas como la ubicación con velocidad instantánea azimutal nula. Está claro que el núcleo gira alrededor del eje de la cámara. La frecuencia de giro se corresponde con un número de Strouhal alrededor de 2.83, calculado en base al diámetro de la cámara y su velocidad mayor.

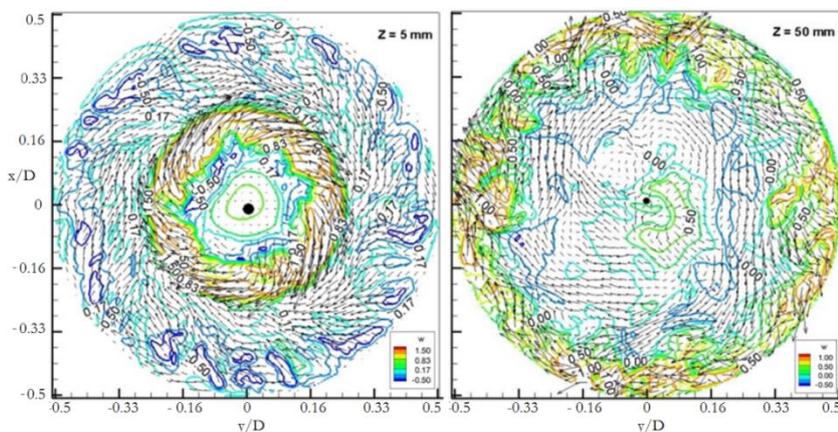


Figura 5-21 Campo de velocidades instantáneas de las secciones transversales $0.04D$ (izq.) y $0.4D$ (dcha.) Contornos de velocidad axial y vectores de velocidad.

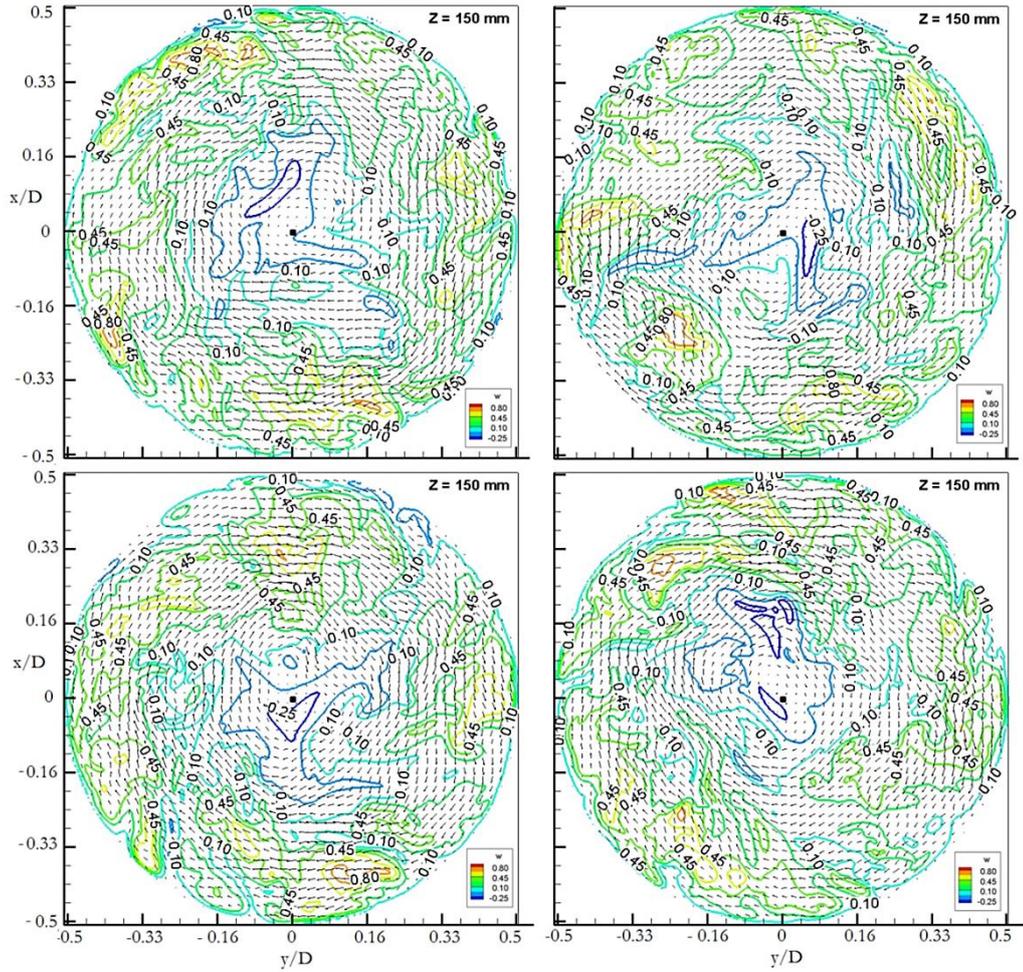


Figura 5-22 Campo de velocidades instantáneas de la sección transversal 1.22D. Los contornos se corresponden con la velocidad axial y vectores de velocidad.

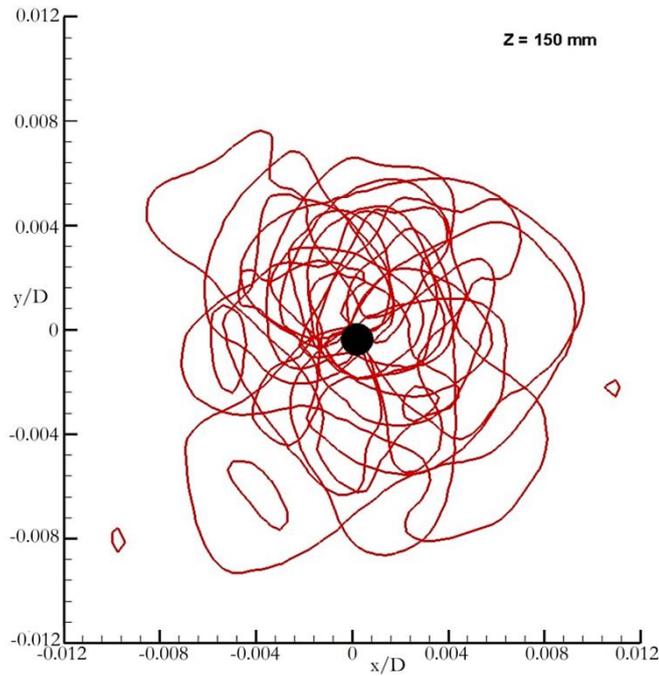


Figura 5-23 Diferentes posiciones de iso velocidad instantánea azimutal igual a cero en la sección transversal $Z = 1.22 \text{ D}$.

5.13 Difusor en la cámara de ensayo

La forma de la zona de expansión (salida de las toberas) tiene influencia en el tamaño de las zonas de recirculación. Así el empleo de una tobera divergente aumenta, en gran medida, el tamaño de la zona de recirculación interior y disminuye la exterior, al mantener el número de swirl del chorro. Los difusores tienen importante influencia en el tamaño y la ubicación de la zona de recirculación, ya que pueden eliminar la separación del flujo.

Se indican brevemente algunos estudios experimentales de difusores con simetría axial. Un difusor cónico de semiángulo 16.5° con diferentes salidas para números de swirl moderados se analizó en Okhio (1983). En Clausen (1993) se estudia la capa de cortadura y las velocidades medias con un difusor cónico de ángulo 20° con número de swirl cercano a los que producen separación. En cuanto a los estudios numéricos de difusores en flujos rotantes, hay una amplia variedad de enfoques, que van desde RANS a LES. Pordal (1993) utiliza el modelo k- ϵ estándar para difusores de semiángulos 12° , 16° , 30° , sin difusor. Cho (1991) desarrolla un modelo de simulación empleando el modelo de turbulencia de tensiones de Reynolds para estudiar difusores cónicos con semiángulos 8° y 20° con y sin rotación.

Se han llevado a cabo varias simulaciones para determinar si la introducción de un difusor cónico puede producir mejoras en el rendimiento de la mezcla en flujo rotante y estudiar cómo se modifica el flujo. Algunos detalles acerca de la geometría del difusor se pueden consultar en el apartado 3.1.4.2.

Se simulan los casos L8 a L19 con OpenFOAM (Tabla 5-2), 9 millones de celdas aproximadamente, con el modelo ILES SSD, combinando número de swirl de 0.6 y 1.2 con difusores de semiángulo 90° (sin dif.), 80° , 70° , 60° , 45° y 30° y generador de swirl de aletas curvas.

Se analizan los contornos de velocidad axial promediada en el tiempo (Figura 5-24) para difusores de semiángulo 90° (sin dif.), 80° , 60° y 30° . Se omiten los contornos de velocidad axial de difusores con semiángulo 70° y 45° puesto que los resultados son similares.

Números de swirl altos producen mayores IRZ y menores ORZ que números de swirl medios. Los difusores dificultan la formación de anillos de vórtices contrarrotantes y de la ORZ.

La fuerza centrífuga asociada con la rotación empuja al fluido hacia la pared del difusor, por lo tanto, es menos probable que la capa límite se separe.

La ORZ desaparece para $S=1.2$ en difusores con semiángulo menor de 80° , mientras que en caso de que $S=0.6$, el semiángulo ha de ser menor de 60° . Esto se debe a que el ángulo de apertura del chorro es mayor, cuanto mayor es el número de swirl, por lo que el chorro de la tobera exterior es afectado por el difusor para menores ángulos de difusor.

Una vez determinadas las principales características del flujo se analizan los perfiles de velocidad axial en función de la posición axial adimensional (Figura 5-25).

Es interesante notar que los perfiles de velocidad de difusores de semiángulos de 30° y 90° (sin difusor) son similares, lo que indica que existe un ángulo intermedio entre estos valores que hace que la IRZ se minimice. Para $S=1.2$ este ángulo es 70° mientras que para $S=0.6$ el ángulo es 45° .

También se analizan las velocidades axiales en función de la posición radial adimensional (Figura 5-26) en secciones adimensionales $z=0.04D$, $z=0.2D$ y $z=0.82D$. No se presentan resultados a mayores posiciones axiales puesto que los perfiles son similares y no aportan información adicional.

Para la sección axial de $z=0.04D$, las curvas de velocidad axial son similares, puesto que esta sección es muy cercana a la entrada de la cámara de ensayo.

Se vuelven a apreciar perfiles similares para semiángulos de 30° y 90° (sin difusor) en posiciones axiales pequeñas.

No se muestran valores completos en $z=0.04D$ y $z=0.2D$ de algunos difusores, puesto que la sección de comparación corta con el propio difusor.

Para la sección axial de $z=0.2D$ y $S=1.2$, se aprecia que difusores de semiángulo de 60° son óptimos en lo que apertura del chorro se refiere. Para la sección axial de $z=0.82D$ y $S=1.2$ se obtiene que el ángulo con menor IRZ es el de 70° . En $S=0.6$ las tendencias no son claras.

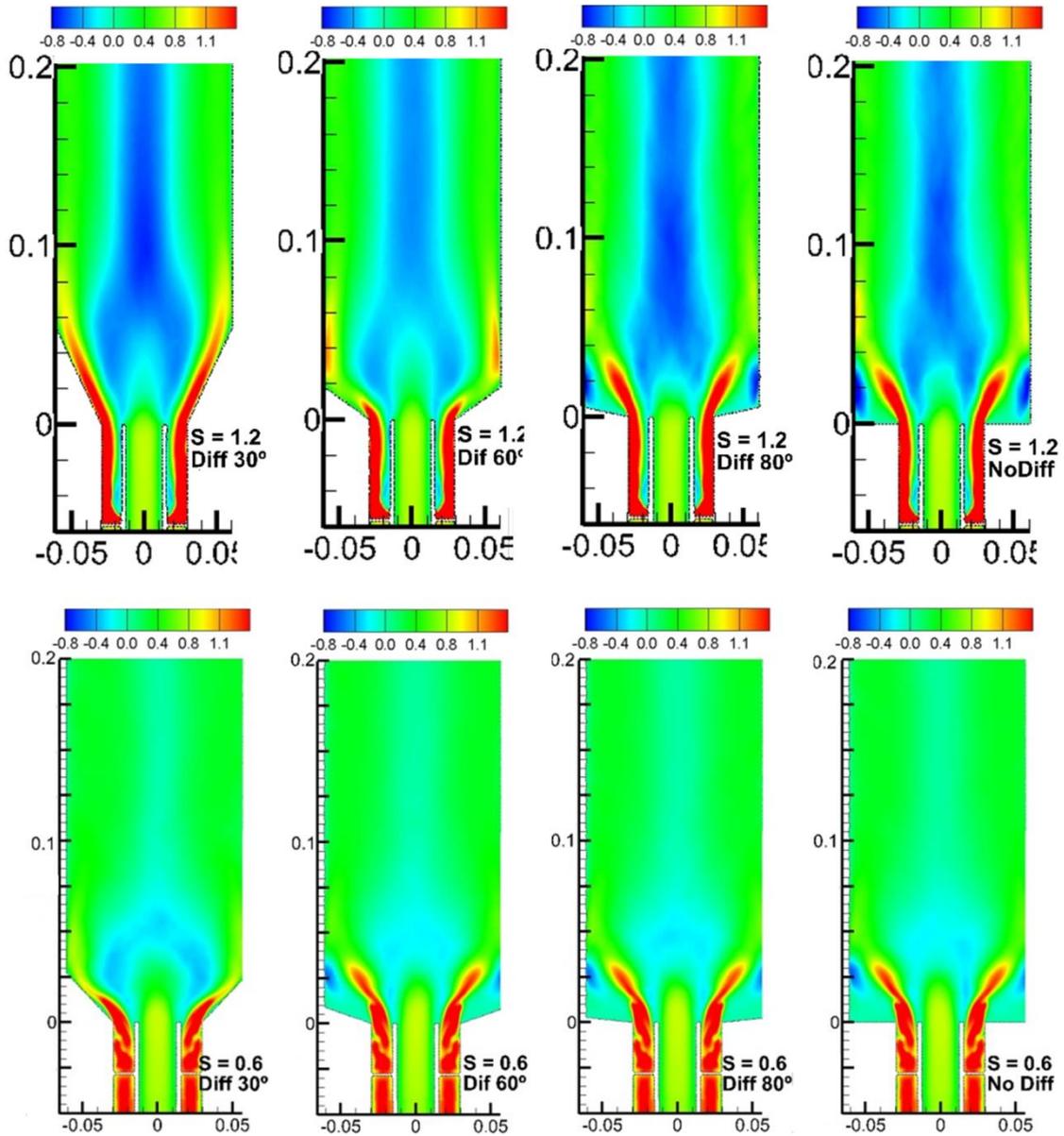


Figura 5-24 Contornos de velocidad axial promediada en el tiempo para números de swirl 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 60°, 80° y 90° (sin difusor)

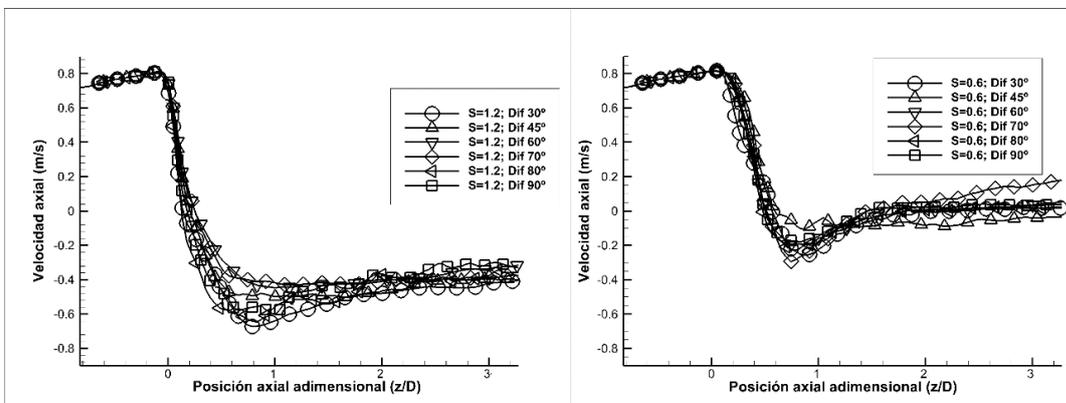


Figura 5-25 Perfiles de velocidad axial en el eje promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 45°, 60°, 70°, 80° y 90° (sin difusor).

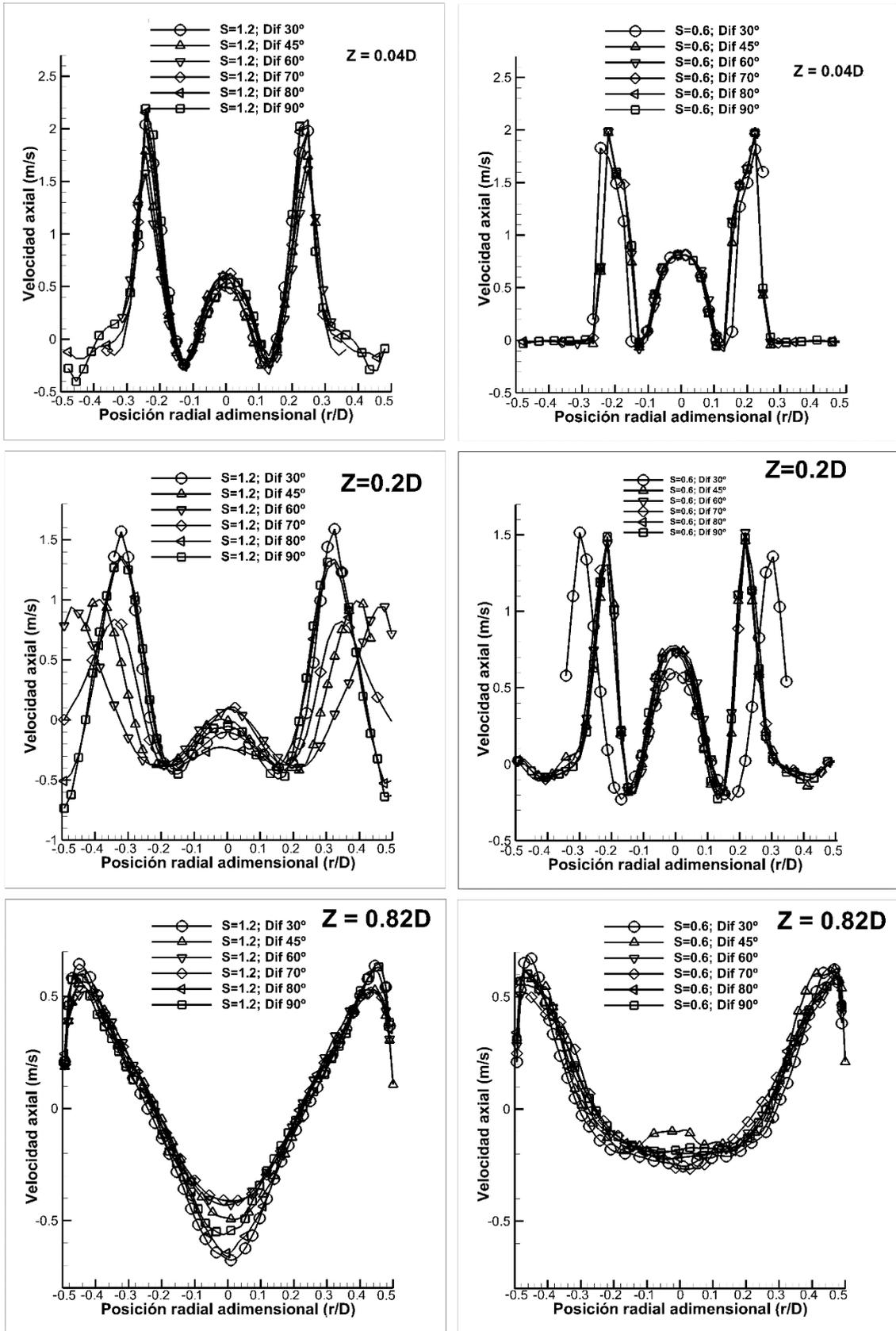


Figura 5-26 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para números de swirl 1.2 (izq.) y 0.6 (dcha.) para difusores de semiángulo 30°, 45°, 60°, 70°, 80° y 90° (sin difusor) para posiciones axiales adimensionales de 0.04D, 0.2D y 0.82D.

5.14 Eficiencia de mezclado

Se postprocesan los casos L8 a L19 simulados con OpenFOAM (Tabla 5-2), 9 millones de celdas aproximadamente, con el modelo ILES SSD, combinando número de swirl de 0.6 y 1.2 con difusores de semiángulo 90° (sin dif.), 80°, 70°, 60°, 45° y 30° y generador de swirl de aletas curvas, para obtener la influencia del número de swirl y del difusor en el mezclado.

Se utiliza el modelo de Baldyga, (1989) implementado mediante UDF's por Fernández-Moguel (2009) y descrito en el apartado 4.5.2 para analizar el mezclado microscópico.

El escalar pasivo adquiere el valor unidad en la tobera interior mientras que en la tobera exterior es 0. Cuando más bajo es el escalar pasivo mejor es el mezclado.

5.14.1 Influencia del número de swirl

Para analizar el mezclado en función del número de swirl, se analizan los contornos de escalar pasivo, para números de swirl de 0.6 y 1.2 (casos L8 y L14). La Figura 5-27 muestra contornos de escalar pasivo para cámaras de ensayo sin difusores, poniendo de manifiesto cómo mayores números de swirl mejoran el mezclado significativamente ya que el escalar pasivo se homogeneiza para menores posiciones axiales.

Números de swirl altos tienen un punto de remanso cerca de la entrada y a continuación, la mezcla se produce muy rápido. Números de swirl bajos necesitan mayor distancia para mezclarse (aproximadamente 2 diámetros).

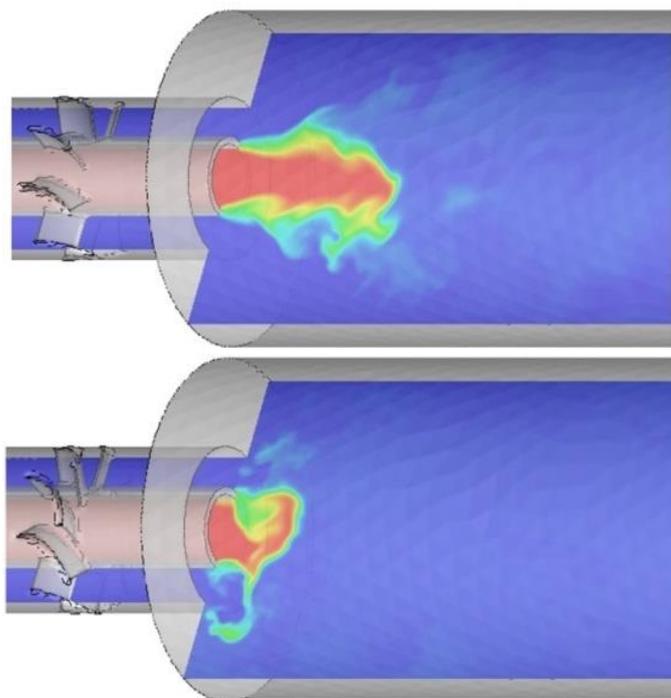


Figura 5-27 Contornos de escalar pasivo para números de swirl de 0.6 (sup.) y 1.2 (inf). Sin difusor.

Se muestran en la Figura 5-28 los escalares pasivos en la sección axial igual a $z=0.2D$ y las líneas de corriente medias para swirl 0.6 y 1.2 para modelos sin difusor. Se aprecia que para alto número de swirl el escalar pasivo es más homogéneo, lo que indica el buen mezclado. La curvatura de las líneas de corriente indica la mayor rotación del chorro de la tobera exterior.

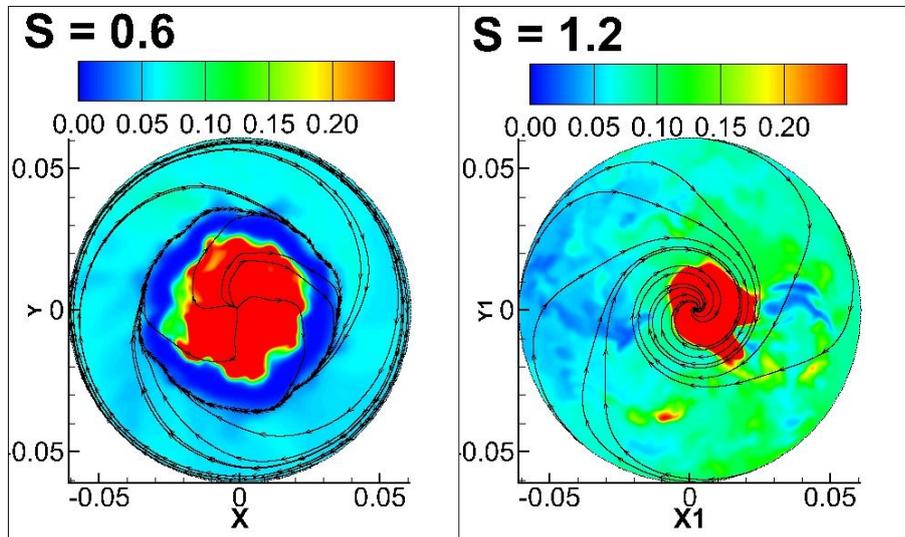


Figura 5-28 Escalar pasivo y líneas de corriente medias en la sección axial en $z=0.2D$, $S=1.2$ y $S=0.6$.

5.14.2 Influencia del difusor

Para analizar el mezclado en función del difusor, se analizan los contornos de escalar pasivo para números de swirl de 0.6 y 1.2 (casos L8 a L19). Se muestran los perfiles de escalar pasivos a lo largo del eje promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30° , 45° , 60° , 70° , 80° y 90° sin difusor en la Figura 5-29.

Para alto swirl se aprecia que difusores de 80° y 90° (sin difusor) tienen un mejor mezclado que los demás casos simulados. Para swirl medio se obtiene que difusores con 70° producen una importante mejora en el mezclado.

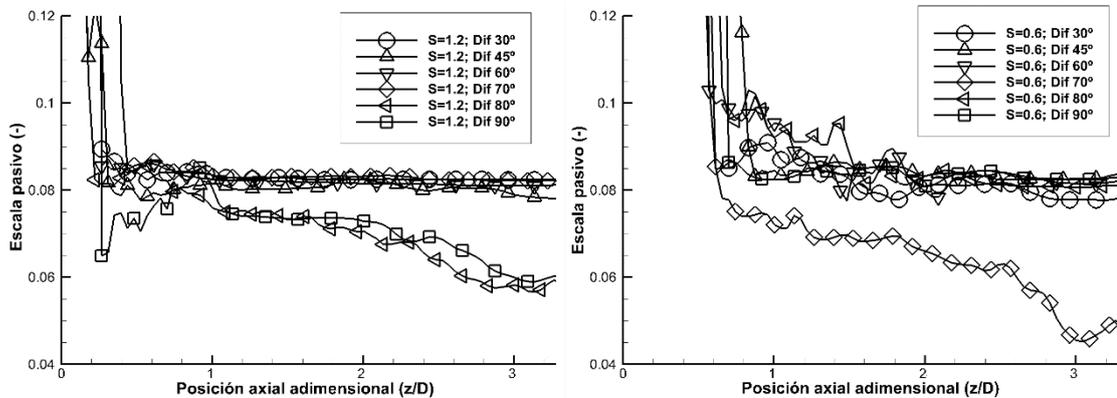


Figura 5-29 Perfiles de escalar pasivos promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30° , 45° , 60° , 70° , 80° y 90° (sin difusor)

Contrastando el escalar pasivo en la Figura 5-30, para swirl 0.6 y 1.2 para difusores de 30°, 60°, 80° y 90° (sin difusor) con generador swirl aletas curvas y modelo ILES SSD se obtiene que el difusor ayuda a reducir ligeramente la longitud de mezcla aunque la tendencia no es concluyente. Sí que se puede establecer que para cada número de swirl existe un difusor intermedio entre 30° y 90° (sin difusor) que podría mejorar la mezcla.

Es importante recordar que la ORZ desaparece en $S=1.2$ en difusores con semiángulo menor de 80° y que en $S=0.6$ el semiángulo ha de ser menor de 60°. Se puede concluir que el mezclado se mejora cerca del punto de desaparición de la ORZ.

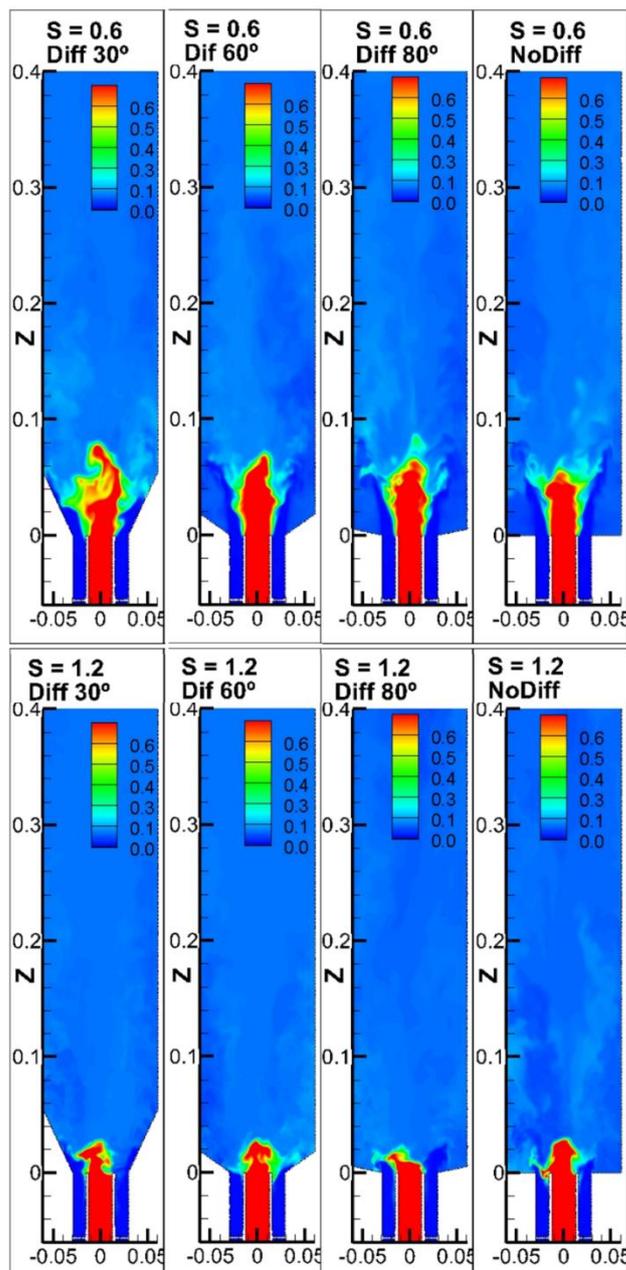


Figura 5-30 Contornos de escalar pasivo promediados en el tiempo para números de swirl 0.6 y 1.2 para difusores de semiángulo 30°, 60°, 80° y 90° (sin difusor).

5.15 Conclusiones

Este capítulo trata sobre la modelización transitoria isoterma mediante simulaciones de grandes torbellinos (LES) en un quemador de flujo rotante.

Para predecir el flujo medio se puede usar RANS, pero ciertas inestabilidades como el PVC, fluctuaciones de presión, flashback de llama, puntos calientes, o apagado deben ser tratadas mediante flujo no estacionario, con mucho más grado de detalle, por lo que el modelo LES, por sus características, puede ser muy buen candidato.

El modelo LES está en auge no solo dentro de la comunidad científica, sino de la industria, como se pone de manifiesto en las últimas tendencias en el estudio de turbinas de gas.

Las simulaciones de grandes remolinos o LES son un enfoque novedoso muy adecuado para el análisis de flujos rotantes, aunque es un reto debido al tratamiento transitorio y alto coste computacional.

A pesar de la complejidad y alto coste computacional, se ha determinado una metodología de tratamiento con LES validada en flujos rotantes. Han sido analizados 19 casos con LES en clústeres de cálculo de alto rendimiento.

Un análisis de sensibilidad del mallado es crucial en LES para determinar el tamaño necesario para resolver las grandes escalas. Se ha encontrado que mallas finas consiguen extraer más energía turbulenta de la corriente principal y generar más producción en las escalas macroscópicas. Se ha determinado que el tamaño óptimo se sitúa en torno a los 10 millones de celdas.

Debido al alto coste computacional de los modelos LES, se han analizado las posibilidades de optimización del cálculo y escalabilidad al emplear un clúster de cálculo de la Red Española de Supercomputación (BSC) al que se ha tenido acceso durante 3 periodos de 4 meses, lanzando simulaciones en 64, 128 y 256 procesadores.

Se ha conseguido simular con éxito el modelo LES con dos códigos CFD (Ansys Fluent y OpenFOAM) y dos submodelos (Smagorinsky y ILES SSD). Se ha demostrado que modelos ILES con SSD son capaces de predecir los flujos rotantes con precisión, ya que la comparativa de dichos resultados promediados frente a los experimentales de Roback et al. 1983 indica un buen ajuste.

Es difícil analizar el patrón de flujo a través de variables instantáneas. Para realizar el análisis del flujo es recomendable realizar un promediado temporal, que deberá ser realizado una vez que la simulación haya convergido completamente.

Una nueva estructura del flujo es descubierta mediante el análisis LES, ya que tiene capacidad para resolver vórtices de grandes escalas (en RANS solo se modela la disipación de energía de estas escalas). Vórtices contrarrotantes y análogos a los que se producen en el fenómeno de inestabilidades de Taylor-Couette aparecen dentro de la ORZ. Este nuevo vórtice se debe a la velocidad relativa entre el chorro rotante de la tobera exterior y la pared fija de la cámara.

Se puede establecer que los pequeños vórtices contrarrotantes están asociados a números de swirl bajos y medios, ya que al aumentar el número de swirl la ORZ disminuye su tamaño y se mueve hacia la pared, haciendo que se fusionen los pequeños vórtices contrarrotantes.

Se analizó la influencia del número de swirl obteniendo tendencias similares a las de modelos RANS. El aumento del número de swirl incrementa la IRZ y hace que se mueva aguas arriba junto con la ORZ. También se comprueban el aumento del ángulo de apertura del chorro y la reducción de la capa de cortadura con el aumento del número de swirl.

Se han empleado con éxito los criterios Q y λ_2 de visualización de vórtices y de las estructuras más energéticas del flujo sobre los modelos LES de Smagorinsky y ILES SSD.

Los modelos LES proporcionan gran cantidad de información que debe ser analizada en el dominio de la frecuencia espacial y/o temporal para conocer importantes detalles del transporte de los fenómenos.

Se ha determinado la bondad de las simulaciones LES, mediante el estudio de la decadencia de la energía turbulenta a través de las distintas escalas. Para ello se realizó un análisis FFT de sondas ubicadas en la región de turbulencia libre para un modelo Smagorinsky, simulado con los códigos Ansys Fluent y OpenFOAM. Ambos logran capturar la pendiente $-5/3$ de la gama inercial, mientras que solo Ansys Fluent es capaz de asociar la pendiente 2 de la energía que contienen las macroescalas con la producción de turbulencia. En el análisis se consideró la hipótesis de Taylor de turbulencia congelada para muestrear la fluctuación de una variable durante un cierto período de tiempo y luego convertir la señal temporal a espacial.

Se ha realizado con éxito un análisis POD sobre dos secciones axiales y una transversal, obteniendo que debido a la naturaleza del flujo, los modos con alta energía se acoplan por pares de casi igual energía. Un análisis de sensibilidad para el número de muestras y el período de muestreo es necesario para asegurar que se puede proporcionar una identificación realista de las estructuras más energéticas del flujo.

El análisis transitorio permite identificar que el flujo no muestra un comportamiento axilsimétrico, ya que el centro instantáneo del torbellino de la IRZ no se encuentra en el eje de la cámara, lo que identifica el *Precessing Vortex Core* (PVC). El muestreo temporal demuestra que el centro de torbellino gira alrededor del eje del dispositivo con un número de Strouhal alrededor de 2.83.

Se aplican modelos LES al estudio del flujo en caso de disponer de un difusor cónico en la zona de expansión. En caso de emplear difusores, aumenta el tamaño de la zona de recirculación interior y disminuye la exterior. Además la fuerza centrífuga asociada a la rotación, lleva el fluido hacia la pared del difusor, por lo tanto, es menos probable la separación de la capa límite. Existen semiángulos intermedios a 30° y 90° (sin difusor) que minimizan la IRZ. Estos ángulos son 45° y 70° (para números de swirl de 0.6 y 1.2 respectivamente). También existe un cierto ángulo a partir del cual la ORZ

desaparece. Esto ocurre para ángulos menores de 60° si $S=0.6$ y para ángulos menores de 80° si $S=1.2$.

Se empleó el modelo de Baldyga (1989), para analizar la micromezcla con modelos LES y poder estudiar las tendencias en el mezclado en función del número de swirl y de los difusores, concluyéndose que el aumento del número de swirl, mejora significativamente el mezclado y que el difusor ayuda ligeramente al mezclado. Además se relaciona un mejor mezclado con el punto de desaparición de la ORZ (60° para $S=0.6$ y 80° para $S=1.2$), ya que difusores de 70° y 80° inducen una mejor mezcla con número de swirl de 0.6 y 1.2 respectivamente.

5.16 Referencias

- [127]. Al-Abdeli, Y. M. and Masri, A.R. (2015). Review of Laboratory Swirl Burners and Experiments for Model Validation. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 12, vol. 69, pp. 178-196. ISSN 0894-1777.
- [128]. Albouze, G., Poinso, T. Gicquel, L. (2009). Chemical kinetics modelling and LES combustion model effects on a perfectly premixed burner. *Comptes Rendus Mécanique*, 0, vol. 337, no. 6–7, pp. 318-328. ISSN 1631-0721.
- [129]. Baldyga, J. (1989). Turbulent Mixer Model with Application to Homogeneous, Instantaneous Chemical Reactions. *Chemical Engineering Science*, vol. 44, no. 5, pp. 1175-1182. ISSN 0009-2509.
- [130]. Bensow R. E. and Bark G. (2010). Simulating Cavitating Flows with LES in OpenFoam. V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD.
- [131]. Bulat, G., JONES, W. P. and Navarro-Martinez, S. (2015) Large Eddy Simulations of Isothermal Confined Swirling Flow in an Industrial Gas-Turbine. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 51, pp. 50-64. ISSN 0142-727X.
- [132]. Congedo P.M, Dupra C., Balarac G. and Corre C. (2013) Numerical prediction of turbulent flows using Reynolds-averaged Navier–Stokes and Large-Eddy Simulation with uncertain inflow conditions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 72, no. 3, pp. 341-358. ISSN 1097-0363.
- [133]. Davidson, L. (2007). Hybrid LES-RANS: Inlet Boundary Conditions for Flows Including Recirculation. 5th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena TU Munich, vol. 2, pp. 689–694.
- [134]. Domingo, P., Vervisch, L., Payet, S., Hauguel, R. (2005). DNS of a premixed turbulent V flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FDI- tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, vol.143, no4 pp. 566-586. ISSN 0010-2180.
- [135]. Duwig, C., Gherman, B. Mihaescu, M., Salewski, M. and Fuchs, L. (2005) Numerical Study of Thermo-Acoustic Waves Generation by a Swirling Flame

- using a New Approach Based on Large Eddy Simulation. ASME Turbo Expo 2005: Power for Land, Sea, and Air. Paper No.GT2005-68136 vol. 2, pp. 67-75.ISSN 0-7918-4725-X.
- [136]. Duwig, C. and Fuchs, L. (2007). Large Eddy Simulation of Vortex breakdown/flame Interaction. *Physics of Fluids*, vol. 19, no. 7, pp. 075103.
- [137]. Duwig, C., Fuchs, L., Lacarelle, A., Beutke, M. and Paschereit, C.O. (2007). Study of the Vortex Breakdown in a Conical Swirler using LDV, LES and POD. New York, NY: American Society of Mechanical Engineers, Paper No. GT2007-27006, pp. 1-10.
- [138]. Esclapez, L., Riber, E., Cuenot, B. (2015). Ignition Probability of a Partially Premixed Burner using LES. *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 35, no. 3, pp. 3133-3141. ISSN 1540-7489.
- [139]. Fernandez-Moguel, L. (2009), “Modelisation par CFD de la precipitation du carbonate de baryum en reacteur a lit fluidise”, PhD Thesis, National Polytechnic Institute of Lorraine, Nancy.
- [140]. García-Villalba, M. and Fröhlich, J. (2006). LES of a Free Annular Swirling Jet – Dependence of Coherent Structures on a Pilot Jet and the Level of Swirl. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 10, vol. 27, no. 5, pp. 911-923. ISSN 0142-727X.
- [141]. Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. and Cabot, W.H. (1991) A Dynamic subgrid-scale Eddy Viscosity Model. *Physics of Fluids A*, vol. 3, no. 7, pp. 1760-1765.
- [142]. Gicquel, L. Y. M., Staffelbach, G., and Poinso, T. (2012). Large Eddy Simulations of Gaseous Flames in Gas Turbine Combustion Chambers. *Progress in Energy and Combustion Science*, 12, vol. 38, no. 6, pp. 782-817. ISSN 0360-1285.
- [143]. Grinstein, F., Margolin, L.G. and Rider, W.J. (2007). *Implicit Large Eddy Simulation, Computing Turbulent Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, ISBN 978-0-511-53974-9.
- [144]. Haller, G. (2005). An Objective Definition of a Vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 525, pp. 1-26.
- [145]. Kitano, T., Kaneko, K., Kurose, R., Komori, S. (2016). Large-Eddy Simulations of Gas- and Liquid-Fueled Combustion Instabilities in Back-Step Flows. *Combustion and Flame*, 8, vol. 170, pp. 63-78. ISSN 0010-2180.
- [146]. Oran, E. S., and Boris, J. P. (2000). *Numerical simulation of reactive flow*. Cambridge University Press, 2nd ed. ISBN 0-521-58175-3
- [147]. Pope, S. B. (2000) *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, ISBN 9780521598866.

- [148]. Riber, E., Moureau, V.; García, M., Poinso, T., Simonin, O. (2009). Evaluation of Numerical Strategies for Large Eddy Simulation of Particulate Two-Phase Recirculating Flows. *Journal of Computational Physics*, 2/1, vol. 228, no. 2, pp. 539-564. ISSN 0021-9991.
- [149]. Roback, R. and Johnson, B.V. (1983). Mass and Momentum Turbulent Transport Experiments with Confined Swirling Coaxial Jets. NASA Technical Reports NASA-CR-168252
- [150]. Roth M. and Peikert. R. (1998). A Higher-order Method for Finding Vortex Core Lines. *Proceedings of IEEE Visualization*, pp.143-150.
- [151]. Sagaut, P. (2006) *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg ISBN 978-3-540-26403-3.
- [152]. Sengissen, A. X., Van Kampen, J.F., Huls, R.A., Stoffels, G.G.M., Kok, J.B.W., Poinso, T.J. (2007). LES and Experimental Studies of Cold and Reacting Flow in a Swirled Partially Premixed Burner with and without Fuel Modulation. *Combustion and Flame*, 7, vol. 150, no. 1–2, pp. 40-53. ISSN 0010-2180.
- [153]. Subramanian, V., Domingo, P. and Vervisch, L. (2010). Large Eddy Simulation of Forced Ignition of an Annular Bluff-Body Burner. *Combustion and Flame*, 3, vol. 157, no. 3, pp. 579-601. ISSN 0010-2180.
- [154]. Syred, N. (2006). A Review of Oscillation Mechanisms and the Role of the Precessing Vortex Core (PVC) in Swirl Combustion Systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 32, no. 2, pp. 93-161. ISSN 0360-1285.
- [155]. Valera-Medina, A., Syred, N. and Griffiths, A. (2009). Visualisation of Isothermal Large Coherent Structures in a Swirl Burner. *Combustion and Flame*, 9, vol. 156, no. 9, pp. 1723-1734. ISSN 0010-2180.
- [156]. Vuorinen, V., Larmi, M., Schlatter, P., Fuchs, L., Boersma, B.J. (2012). A Low-Dissipative, Scale-Selective Discretization Scheme for the Navier–Stokes Equations. *Computers & Fluids*, 11/30, vol. 70, pp. 195-205. ISSN 0045-7930.
- [157]. Wang, P., and Bai, X. S. (2005) Large Eddy Simulations of Turbulent Swirling Flows in a Dump Combustor: A Sensitivity Study. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 47, no. 2, pp. 99-120. ISSN 1097-0363.
- [158]. Yang, (2015). Large-eddy simulation: Past, present and the future. *Chinese Journal of Aeronautics*, vol. 28, no. 1, pp. 11-24
- [159]. Young, D. L., Liao, C. B. and Sheen, H. J. (1999). Computations of Recirculation Zones of a Confined Annular Swirling Flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 29, no. 7, pp. 791-810. ISSN 1097-0363.
- [160]. Yu, J., Vuorinen, V., Kaario, O., Sarjoavaara, T., Larmi, M. (2013). Visualization and Analysis of the Characteristics of Transitional Underexpanded Jets.

International Journal of Heat and Fluid Flow, 12, vol. 44, pp. 140-154. ISSN 0142-727X.

CAPÍTULO 6

ANÁLISIS REACTIVO

6	ANÁLISIS REACTIVO.....	195
6.1	INTRODUCCIÓN.....	195
6.1.1	Combustión.....	195
6.1.2	Mezclado y localización de la llama.....	196
6.1.3	Temperatura adiabática de llama.....	196
6.2	MODELO NUMÉRICO.....	197
6.2.1	Geometría.....	197
6.2.2	Condiciones operativas.....	197
6.2.3	Modelo de turbulencia y discretización.....	199
6.2.4	Modelos de combustión.....	199
6.2.5	Mallado.....	203
6.2.6	Casos analizados, hardware y software.....	205
6.3	ESTUDIO MODELOS DE COMBUSTIÓN.....	205
6.3.1	Temperatura adiabática de llama.....	212
6.4	PATRÓN DE FLUJO REACTIVO Y ESTRUCTURA DE LA LLAMA.....	213
6.4.1	Modelo isoterma y reactivo.....	213
6.4.2	Estructura del flujo reactivo.....	214
6.5	ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD AL NÚMERO DE SWIRL, A LA ESTEQUIOMETRÍA Y AL DIFUSOR.....	225
6.5.1	Influencia del número de swirl.....	226
6.5.2	Influencia del dosado.....	232
6.5.3	Influencia del difusor.....	239
6.6	CONCLUSIONES.....	244
6.7	REFERENCIAS.....	247

6 ANÁLISIS REACTIVO

Anteriormente, se ha realizado un análisis exhaustivo de la aerodinámica y de la turbulencia en un quemador de flujo rotante. Se ha desarrollado un modelo de simulación robusto y novedoso y se han establecido las bases del modelado isotermo de la presente línea de investigación.

En este capítulo, para completar el análisis de un quemador de flujo rotante, se realiza un estudio de la combustión mediante técnicas RANS.

Se describen los principales criterios de localización de la llama, el modelo numérico empleado para el análisis reactivo, así como las condiciones de contorno y de operación del quemador. Se estudia el flujo reactivo, únicamente con el código Ansys Fluent y se emplean los modelos de combustión: Eddy Dissipation (ED), Eddy Dissipation Concept (EDC) y Probability Density Function (PDF). Se evalúa el ajuste de dichos modelos de combustión con los resultados de temperatura adiabática de llama calculados con el mecanismo de reacción GRI-Mech 3.0. Adicionalmente, se estudia la influencia que tiene en el flujo la consideración de modelos isotermos o reactivos.

Empleando el modelo de combustión óptimo, se estudia la influencia que tiene en el flujo el número de swirl, la geometría del difusor y la estequiometría de la mezcla. Se pretende sentar las bases en el análisis reactivo para estimar los óxidos de nitrógeno, emplear modelos de combustión con cinética detallada y combinar modelos LES con flujo reactivo en trabajos futuros de esta línea de investigación.

6.1 Introducción

6.1.1 Combustión

La configuración que se pretende analizar es no premezclada, por lo que los reactantes entran por separado a través de las toberas interior y exterior. Dado que el número de Damköhler es elevado, la combustión viene dominada por la turbulencia y se puede asumir química rápida. Basándose en la configuración y las hipótesis establecidas, los modelos que se podrían emplear son: ED, EDC y PDF.

El modelo ED considera que las velocidades de reacción están controladas por la turbulencia. El modelo EDC consiste en una extensión del modelo ED que permite la aplicación de mecanismos de reacción globales o semidetallados junto al modelado del flujo turbulento. El modelo PDF utiliza resultados tabulados a priori de llamas y considera la hipótesis de equilibrio químico, ya que se asume química rápida. La resolución de las ecuaciones de conservación de la fracción de mezcla y su correspondiente varianza permite conocer todos los escalares termoquímicos como las especies, densidad y temperatura ya que únicamente dependen de ésta. En el apartado 2.6 se han clasificado y detallado las características de cada modelo de combustión.

6.1.2 Mezclado y localización de la llama.

Cuando se produce la combustión entre dos fluidos, se genera una llama, que es la zona gaseosa donde se producen las reacciones. Aplicando el criterio de frente de llama se pueden distinguir varias regiones dentro de la mezcla y la combustión:

- Mezcla fresca o zona de no quemados: No existe reacción.
- Zona de reacción: En esta zona se producen las reacciones químicas. Coincide con la llama. Se produce una expansión.
- Zona de quemados: La temperatura aumenta hasta alcanzar valores máximos

La zona de reacción se ubica en la capa de cortadura en los quemadores de flujo rotante. Es importante localizar numéricamente dicha zona, aunque debido a su inestabilidad es complejo. Se proponen varios criterios, que posteriormente serán evaluados, para analizar la localización de la llama:

- Temperatura máxima.
- Región al 80% de la temperatura máxima alcanzada.
- Máximo gradiente de temperatura.
- Máxima varianza de la fracción de mezcla (Válido solo para el modelo PDF).
- Región donde se alcanza un 10% de la fracción másica de combustible.
- Máximo gradiente de fracción másica de combustible.
- Máxima energía cinética turbulenta.
- Máxima disipación de energía cinética turbulenta.

6.1.3 Temperatura adiabática de llama

Para evaluar la bondad de los resultados numéricos del análisis reactivo, es necesario compararlos frente a resultados experimentales. Actualmente no existe una metodología clara para la validación de los modelos reactivos, por lo que se propone evaluar la validez de los modelos reactivos mediante la comparativa de los mismos con la temperatura adiabática de llama. Ésta se alcanza cuando la reacción es completa, se efectúa sin intercambio de calor con el entorno y no se produce trabajo. Por el motivo anterior, se considera el quemador aislado térmicamente. En este caso las temperaturas máximas se alcanzarán en la parte final del quemador.

Los resultados se comparan frente a los obtenidos mediante CHEMK6 (Dwyer, 2002), un programa para el cálculo de equilibrio de gases ideales relacionado con motores de combustión interna. Este programa dispone de la capacidad de cálculo de la temperatura adiabática de llama, con entalpía y presión constantes para varios combustibles y mezclas, entre los que se incluye el metano. Se basa en la biblioteca GRI-Mech, que considera mecanismos de reacción con química detallada optimizada. GRI-Mech es esencialmente una biblioteca de reacciones químicas elementales y constantes que se han estudiado en laboratorio.

El mecanismo ha sido utilizado de forma extensiva por la comunidad científica en diferentes softwares como Chemkin y Cantera. Este último es un conjunto de

herramientas de software orientado a objetos para problemas relacionados con los procesos de cinética, termodinámica o el transporte de sustancias químicas.

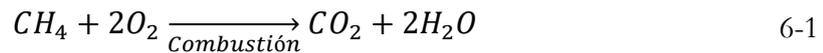
6.2 Modelo numérico

6.2.1 Geometría

Se emplea el modelo geométrico basado en el experimento de Roback-Johnson, descrito en los apartados 2.4.5 y 3.1.4. Se analizan modelos con número de swirl bajos (0.2), medios (0.6) y altos (1.1) y con difusores de semiángulo 30° 60° y 90° (sin difusor).

6.2.2 Condiciones operativas

El quemador opera con metano y un gas inerte, por la tobera interior, mientras que por la tobera exterior penetra una mezcla de nitrógeno y oxígeno. La mezcla de la tobera exterior contiene un 78 % de nitrógeno y un 22 % de oxígeno. Para que la combustión se produzca en proporción estequiométrica, se introduce la cantidad correspondiente de combustible por la tobera interior. La reacción global considerada es la siguiente:



El dosado relativo Φ_r hace referencia a la proporción combustible- aire (en masa) frente a la relación combustible-aire en proporciones estequiométricas. El dosado estequiométrico para el metano (CH_4) es 1/17.24 o 0.058. Las ecuaciones 6-2 y 6-3 permiten calcular el dosado y el dosado relativo en función de las condiciones de operación del quemador.

Puesto que las condiciones de velocidad en la entrada y la salida son fijas, para poder comparar dichos resultados con los casos de referencia, se necesita regular el dosado mediante la modificación de la fracción másica de metano a la entrada. Se emplea un gas inerte con las mismas propiedades que el metano en la tobera interior para no modificar las propiedades de la mezcla. Las condiciones operativas del quemador se resumen en la Tabla 6-1.

$$\Phi = \frac{\dot{m}_{CH_4}}{\dot{m}_{aire}} = \frac{\rho_{cn} \cdot v_{cn} \cdot A_{cn} \cdot y_{comb}}{\rho_{an} \cdot v_{an} \cdot A_{an.}} \quad 6-2$$

$$\Phi_r = \frac{\Phi}{\Phi_{esteq.}} \quad 6-3$$

Se muestran las propiedades de la mezcla y los dosados empleados en la

Tabla 6-2. Se precalienta el aire que penetra por la tobera exterior, para disponer de la suficiente energía de activación, y que se produzca la combustión al entrar en contacto el combustible con el comburente.

Habitualmente se suelen utilizar algunas estrategias numéricas para proceder a la ignición de la mezcla como reducir la energía de activación y aumentarla progresivamente para que la reacción tenga lugar o modificar artificialmente la temperatura de la zona de mezcla para tener un mecanismo iniciador de la combustión.

La ignición de la mezcla se produce de forma correcta en todos los modelos analizados salvo en el modelo EDC. En este modelo para proceder a la ignición se reduce la energía de activación hasta que se produce la combustión y posteriormente se aumenta progresivamente, hasta que se llega al valor correspondiente.

Tabla 6-1 Condiciones operativas

Condición	Tobera interior	Tobera exterior	Cámara combustión
Fluido	CH ₄ +G.Inerte	Aire	-
Velocidad (m/s)	0.66	1.541	-
Área (m ²)	4.903·10 ⁻⁴	1.998·10 ⁻³	1.168·10 ⁻²
Densidad (kg/m ³)	0.6679	0.3869	-
Gasto másico (kg/s)	5.0582·10 ⁻⁵	8.94·10 ⁻⁴	-
Diámetro característico (m)	0.025	0.028	0.122
Intensidad turbulenta (%)	12	7.5	-
Número de Reynolds	1130	3617	2973
Conductividad térmica (W/m/K)	0.0332	0.0242	
Temperatura (K)	300	900	
c _p (J/Kg °K)	f(T)	f(T)	f(T)
Fracción másica	0.234 CH ₄	0.22O ₂ +0.78N ₂	
Peso molecular (kg/kg/mol)	16.043	28.996	
Viscosidad (kg/(m·s))	1.7894·10 ⁻⁵	1.7894·10 ⁻⁵	

Tabla 6-2 Dosado y propiedades de la mezcla

Variable	Tobera interior	Tobera exterior
Componente	CH ₄ +Gas Inerte	Aire
Velocidad (m/s)	0.66	1.541
Área (m ²)	4.903·10 ⁻⁴	1.998·10 ⁻³
Densidad 300K (kg/m ³)	0.6679	-
Densidad 900K (kg/m ³)	-	0.3869
<u>Mezcla pobre $\Phi_r=0.75$</u>		
Fracción másica	0.234 CH ₄	0.22O ₂ +0.78N ₂
Gasto másico CH ₄ (kg/s) ·10 ⁻³	0.506	11.912
<u>Mezcla estequiométrica $\Phi_r=1$</u>		
Fracción másica	0.319 CH ₄	0.22O ₂ +0.78N ₂
Gasto másico CH ₄ (kg/s) ·10 ⁻³	0.680	11.912
<u>Mezcla rica $\Phi_r=1.25$</u>		
Fracción másica	0.4 CH ₄	0.22O ₂ +0.78N ₂
Gasto másico CH ₄ (kg/s) ·10 ⁻³	0.865	11.912

6.2.3 Modelo de turbulencia y discretización

Se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes mediante técnicas RANS con modelo de turbulencia k- ϵ RNG Swirl Dominated empleando discretizaciones de segundo orden. El acoplamiento P-V considerado es SIMPLEC.

6.2.4 Modelos de combustión

Los modelos analizados son los siguientes:

- Modelo no reactivo isoterma

Solo se resuelve el flujo, es decir, no se tiene en cuenta transferencia de calor ni masa (Modelo empleado en el capítulo 3).

- Modelo no reactivo con transferencia de calor:

Se estudia únicamente el mezclado y la transferencia de calor pero sin reacción química. Este modelo se denomina “sin reacción” en las figuras y gráficas de este capítulo.

- Modelo ED

Las velocidades de reacción están gobernadas por la turbulencia, por lo que no es necesario implementar ningún mecanismo de reacción adicional. Únicamente se consideran los componentes, metano, oxígeno, dióxido de carbono, vapor de agua y nitrógeno. Se consideran reacciones volumétricas.

- Modelo EDC

Este modelo admite la utilización de mecanismos de reacción globales o semidetallados. Esto ocasiona un alto incremento del tiempo de cálculo, ya que la resolución de la cinética química es muy costosa. Algunos mecanismos de reacción detallados pueden verse en referencias clásicas como Warnatz (2006), Peters (1988), Westbrook (1985), Miller y Bowman (1989) y recientemente en el estándar GRI-Mech v. 3.0 (2016).

Un mecanismo simplificado es aquel que solo considera las cadenas principales para reducir el coste computacional. Éstos suelen obtenerse a través de un análisis de sensibilidad. En este trabajo solo se emplean mecanismos simplificados debido al alto coste computacional.

Algunos mecanismos simplificados que proporcionan buenos resultados, son los obtenidos por Westbrook y Dryer (1981), Jones y Lindstedt (1988) o Edelman y Harsha (1978). Estos mecanismos son llamados cuasi globales.

Los parámetros más significativos de cada mecanismo de reacción se relacionan según la ecuación de Arrhenius (6-4).

$$k_r^F = A_r T^\beta e^{\left(\frac{-E_r}{RT}\right)} \quad 6-4$$

Se consideran reacciones globales directas (sin reacciones reversibles), ya que los productos de reacción no afectan en exceso a la tasa de reacción directa. Los mecanismos simulados no incluyen el cálculo de óxidos de nitrógeno.

El mecanismo de reacción más sencillo que ha sido analizado es el desarrollado por Westbrook (1981). Éste considera una reacción global y cuatro especies. Las temperaturas adiabáticas de llama resultantes de dicho mecanismo de reacción no se predicen adecuadamente en comparación con los resultados de química GRI-MECH 3.0. En la medida de lo posible se recomienda usar mecanismos de más pasos. La Tabla 6-3 muestra los parámetros del mecanismo de Westbrook, 1981.

Tabla 6-3 Parámetros de un mecanismo de una reacción (Westbrook, 1981)

	β	E_r [j/Kmol]	A_r (cal/mol)	Exp.
$\text{CH}_4 + 3/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$	0	$1.1 \cdot 10^8$	20000	$[\text{CH}_4]^{0.5} [\text{O}_2]^{1.25}$

Se emplea también un mecanismo ligeramente más avanzado, de dos reacciones globales (oxidación del combustible y equilibrio de CO-CO₂), denominado BFER's o 2S CH₄ BFER, (Franzelli, 2012). Este mecanismo proporciona resultados aceptables para presiones atmosféricas y para dosados menores de 1.4. Sus parámetros se indican en la Tabla 6-4.

Tabla 6-4 Parámetros de un mecanismo de dos reacciones BFER's o 2S CH₄ BFER (Franzelli, 2012)

	β	E_r [j/Kmol]	A_r (cal/mol)	Exp.
$\text{CH}_4 + 3/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$	0	$4.9 \cdot 10^9$	35500	$[\text{CH}_4]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.65}$
$\text{CO} + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	0.7	$2 \cdot 10^8$	12000	$[\text{CO}] [\text{O}_2]^{0.5}$

El mecanismo más detallado analizado es el desarrollado por Jones y Linstedt (1987). Este mecanismo emplea 4 pasos y considera 7 especies. Es apto para presión atmosférica y de forma general se puede establecer que las predicciones de este mecanismo son mejores para dosados bajos que altos. Se indican su parámetros en Tabla 6-5.

Tabla 6-5 Parámetros de un mecanismo de cuatro reacciones Jones y Linstedt, 1987.

	B	E_r [j/Kmol]	A_r (cal/mol)	Exp.
$\text{CH}_4 + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2$	0	$7.824 \cdot 10^{13}$	30000	$[\text{CH}_4]^{0.5} [\text{O}_2]^{1.25}$
$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$	0	$3.000 \cdot 10^{11}$	30000	$[\text{CH}_4] [\text{H}_2\text{O}]$
$\text{H}_2 + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	-1	$1.209 \cdot 10^{18}$	40000	$[\text{H}_2]^{0.75} [\text{O}_2]$
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	0	$2.75 \cdot 10^{12}$	20000	$[\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]$

En todos los modelos analizados la cámara de combustión se considera aislada térmicamente y no se considera el efecto de la radiación.

- Modelo PDF

El modelo PDF utiliza resultados tabulados a priori de llamas y considera la hipótesis de equilibrio químico, ya que se asume que la química es rápida.

Este modelo se basa en aspectos estadísticos, como se ha comentado anteriormente. La función de densidad de probabilidad considerada es la distribución beta. En el apartado 2.6.7 se pueden consultar los fundamentos teóricos del modelo.

Se emplea el modelo de equilibrio químico y se considera una presión de operación de 101325 Pa.

El tratamiento de la energía puede ser adiabático o no adiabático. El uso de un tratamiento no adiabático es necesario en caso de considerar alguna de las siguientes características:

- Radiación o transferencia de calor por las paredes
- Múltiples entradas de combustible a diferentes temperaturas
- Múltiples oxidantes a diferentes temperaturas
- Combustibles líquidos, partículas de carbón y/o transferencia de calor a las partículas inertes.

Si el modelo de combustión se define adiabático, no es necesario resolver la ecuación de la energía y la temperatura se determina directamente de la fracción de mezcla y de la temperatura del combustible y del oxidante.

La configuración que se simula cumple las hipótesis indicadas anteriormente por lo que sería posible emplear un tratamiento adiabático. Se ha considerado un modelo no adiabático, ya que se pretende dejar las puertas abiertas a la simulación de la radiación y la transferencia de calor por las paredes con los modelos de este trabajo.

Las especies químicas consideradas en el modelo PDF son CH₄, N₂, O₂, H₂O, CO₂, CO, H₂, H, OH, O, NO, N, HO₂, NO₂, NH₃, NH, HNO, N₂O y H₂O₂.

Uno de los conceptos fundamentales para el modelo PDF es la tabla de la que se extraen las propiedades termodinámicas en función de la fracción de mezcla. Ansys Fluent incluye tablas PDF predefinidas. Puesto que los análisis realizados indican que se producen resultados no realistas, produciendo CO₂ antes del quemado, se crea una tabla propia que produzca resultados más realistas en los productos de combustión. La Figura 6-1 muestra la relación que emplea el modelo PDF entre la temperatura y la fracción de mezcla para varias ganancias (HG) y pérdidas de calor (HL).

Las tablas se calculan únicamente una vez en caso de que el dosado permanezca constante. Si se modifica el dosado es necesario recalcular la tabla de nuevo. La regulación del dosado se hace a través de la fracción de combustible a la entrada.

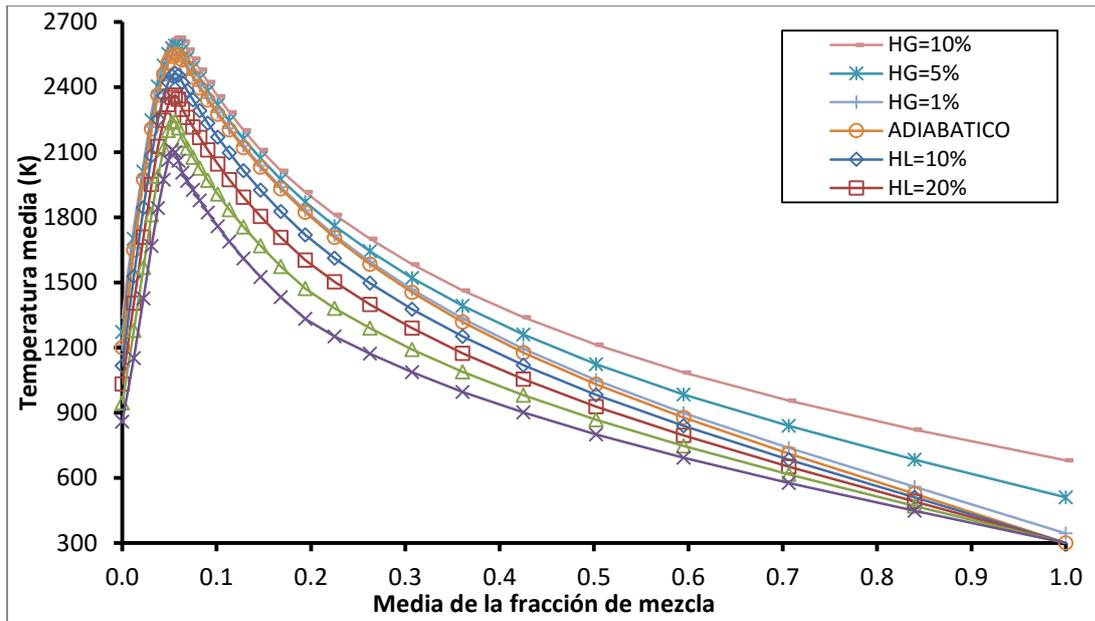


Figura 6-1 Temperatura en función de la fracción de mezcla para varias ganancias (HG) y pérdidas de calor (HL). Modelo PDF. S=1.1

La capacidad calorífica a presión constante (c_p) se considera función de la temperatura. Los coeficientes considerados (5) para el polinomio se indican en 6-5 y la Tabla 6-6.

$$C_p(T) = AT^0 + BT^1 + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad 6-5$$

Aplicando este concepto para todos los componentes de la reacción del modelo PDF se obtiene la Tabla 6-6, que muestra los coeficientes empleados para los rangos de temperatura 300-1000 K y 1000-5000 K.

Tabla 6-6 Coeficientes de la polinomial del C_p para cada componente de la reacción

Comp.	Rango T.(K)	A	B	C	D	E
H ₂ O ₂	300-1000	8.283E+02	1.606E+00	-3.630E-05	-1.131E-06	6.041E-10
	1000-5000	1.118E+03	1.060E+00	-3.605E-04	5.742E-08	-3.499E-12
N ₂ O	300-1000	4.804E+02	1.793E+00	-1.850E-03	1.183E-06	-3.593E-10
	1000-5000	8.914E+02	5.429E-01	-2.262E-04	4.251E-08	-2.976E-12
HNO	300-1000	7.465E+02	1.772E+00	-2.493E-03	2.530E-06	-1.006E-09
	1000-5000	9.692E+02	8.612E-01	-3.379E-04	6.078E-08	-4.118E-12
NH	300-1000	1.849E+03	6.939E-01	-1.933E-03	2.336E-06	-8.625E-10
	1000-5000	1.528E+03	7.616E-01	-2.465E-04	4.260E-08	-2.778E-12
NH ₃	300-1000	1.076E+03	4.938E+00	-7.153E-03	7.065E-06	-2.601E-09
	1000-5000	1.202E+03	2.958E+00	-9.788E-04	1.531E-07	-9.463E-12
NO ₂	300-1000	4.826E+02	1.417E+00	-1.457E-03	1.114E-06	-4.193E-10
	1000-5000	8.463E+02	4.450E-01	-1.884E-04	3.573E-08	-2.515E-12
HO ₂	300-1000	7.506E+02	1.259E+00	-9.549E-04	5.930E-07	-2.038E-10
	1000-5000	1.026E+03	5.369E-01	-1.337E-04	1.540E-08	-7.157E-13
N	300-1000	1.486E+03	-1.294E-02	3.218E-05	-3.352E-08	1.246E-11
	1000-5000	1.454E+03	6.329E-02	-4.431E-05	1.116E-08	-6.090E-13
NO	300-1000	9.356E+02	3.472E-01	-9.152E-04	1.446E-06	-6.778E-10
	1000-5000	8.993E+02	3.517E-01	-1.390E-04	2.541E-08	-1.739E-12
O	300-1000	1.531E+03	-8.513E-01	1.258E-03	-8.329E-07	2.022E-10
	1000-5000	1.321E+03	-1.432E-02	-1.612E-06	2.365E-09	-2.270E-13
OH	300-1000	1.778E+03	9.049E-02	-8.194E-04	1.167E-06	-4.122E-10
	1000-5000	1.409E+03	4.957E-01	-1.113E-04	1.063E-08	-2.506E-13
H	300-1000	2.062E+04	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

Comp.	Rango T.(K)	A	B	C	D	E
H ₂	1000-5000	2.062E+04	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	300-1000	1.360E+04	3.402E+00	-3.359E-03	-3.908E-07	1.705E-09
	1000-5000	1.234E+04	2.887E+00	-2.324E-04	-3.807E-08	6.528E-12
CO	300-1000	9.684E+02	4.488E-01	-1.152E-03	1.657E-06	-7.346E-10
	1000-5000	8.979E+02	4.282E-01	-1.671E-04	3.023E-08	-2.051E-12
CO ₂	300-1000	4.299E+02	1.874E+00	-1.966E-03	1.297E-06	-4.000E-10
	1000-5000	8.414E+02	5.932E-01	-2.415E-04	4.523E-08	-3.153E-12
H ₂ O	300-1000	1.563E+03	1.604E+00	-2.933E-03	3.216E-06	-1.157E-09
	1000-5000	1.233E+03	1.411E+00	-4.029E-04	5.543E-08	-2.950E-12
O ₂	300-1000	8.348E+02	2.930E-01	-1.496E-04	3.414E-07	-2.278E-10
	1000-5000	9.608E+02	1.594E-01	-3.271E-05	4.613E-09	-2.953E-13
N ₂	300-1000	9.790E+02	4.180E-01	-1.176E-03	1.674E-06	-7.256E-10
	1000-5000	8.686E+02	4.416E-01	-1.687E-04	2.997E-08	-2.004E-12
CH ₄	300-1000	4.036E+02	9.057E+00	-1.443E-02	1.581E-05	-6.343E-09
	1000-5000	8.725E+02	5.306E+00	-2.008E-03	3.517E-07	-2.334E-11
H ₂ O	300-1000	1.563E+03	1.604E+00	-2.933E-03	3.216E-06	-1.157E-09
	1000-5000	1.233E+03	1.411E+00	-4.029E-04	5.543E-08	-2.950E-12

6.2.5 Mallado

En el capítulo 3, se concluyó que el tamaño óptimo de malla era de aproximadamente 1.6 millones de celdas, siendo preferible las mallas hexaédricas por su notable convergencia. En este apartado se analiza el efecto que tiene en el flujo reactivo, el tamaño y tipo de celdas. La Figura 6-2 muestra la temperatura y el mallado de tres modelos con idénticas características pero con distinto mallado. Se analizan una malla hexaédrica de 2.3 millones (izq.), una malla hexaédrica de 0.6 millones (centro) y una malla tetraédrica de 1.6 millones (dcha.).

Se aprecian mínimas diferencias entre mallas hexaédricas. La malla tetraédrica predice mal la llama, ya que ésta se produce ligeramente aguas arriba de la capa de cortadura. Esto no es realista, ya que la llama solo puede generarse en zonas posteriores al mezclado de los dos chorros. En mallas tetraédricas las temperaturas se uniformizan en menores posiciones axiales que en las hexaédricas. La malla hexaédrica 0.6 millones de celdas produce temperaturas ligeramente más bajas a lo largo del eje que la de 2.3 millones. El análisis de velocidades realizado proporciona velocidades similares, por lo que no se incluye.

La Figura 6-3 muestra los perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional, para una malla hexaédrica de 2.3 millones de celdas, una hexaédrica de 0.6 millones de celdas y una tetraédrica de 1.6 millones de celdas, para posiciones axiales de 0.04D y 0.2D.

Se aprecia que para posiciones radiales pequeñas no existen diferencias, mientras que para posiciones radiales grandes las mallas de 0.6 millones de celdas hexaédricas y 1.6 millones de celdas tetraédricas subestiman y sobreestiman la temperatura en posiciones axiales pequeñas respectivamente. Para posiciones axiales mayores (0.2D) la malla tetraédrica difiere en la parte exterior de la cámara de combustión.

Se construirán mallas de entre 2 y 2.5 millones de celdas hexaédricas en el análisis reactivo, salvo en los casos que incluyen un difusor que, por complejidad geométrica, han de mallarse con celdas tetraédricas con un refinado adicional en la zona de interés. Los análisis han sido realizados empleando un modelo PDF.

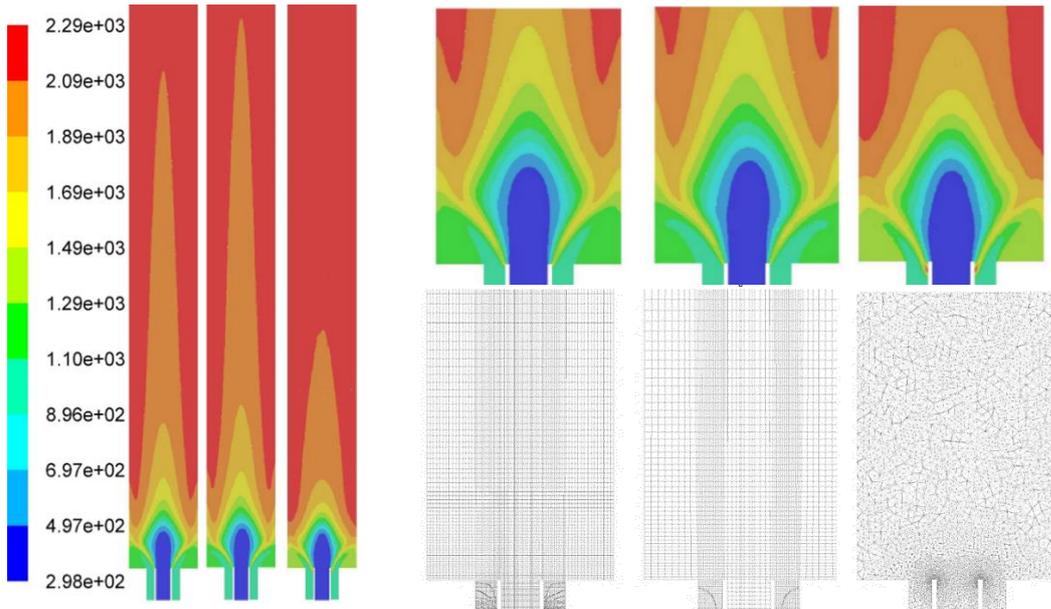


Figura 6-2 Temperatura y mallado. Malla hexaédrica 2.3 millones (izq.), malla hexaédrica 0.6 millones (centro) y Malla tetraédrica 1.6 millones (dcha.)

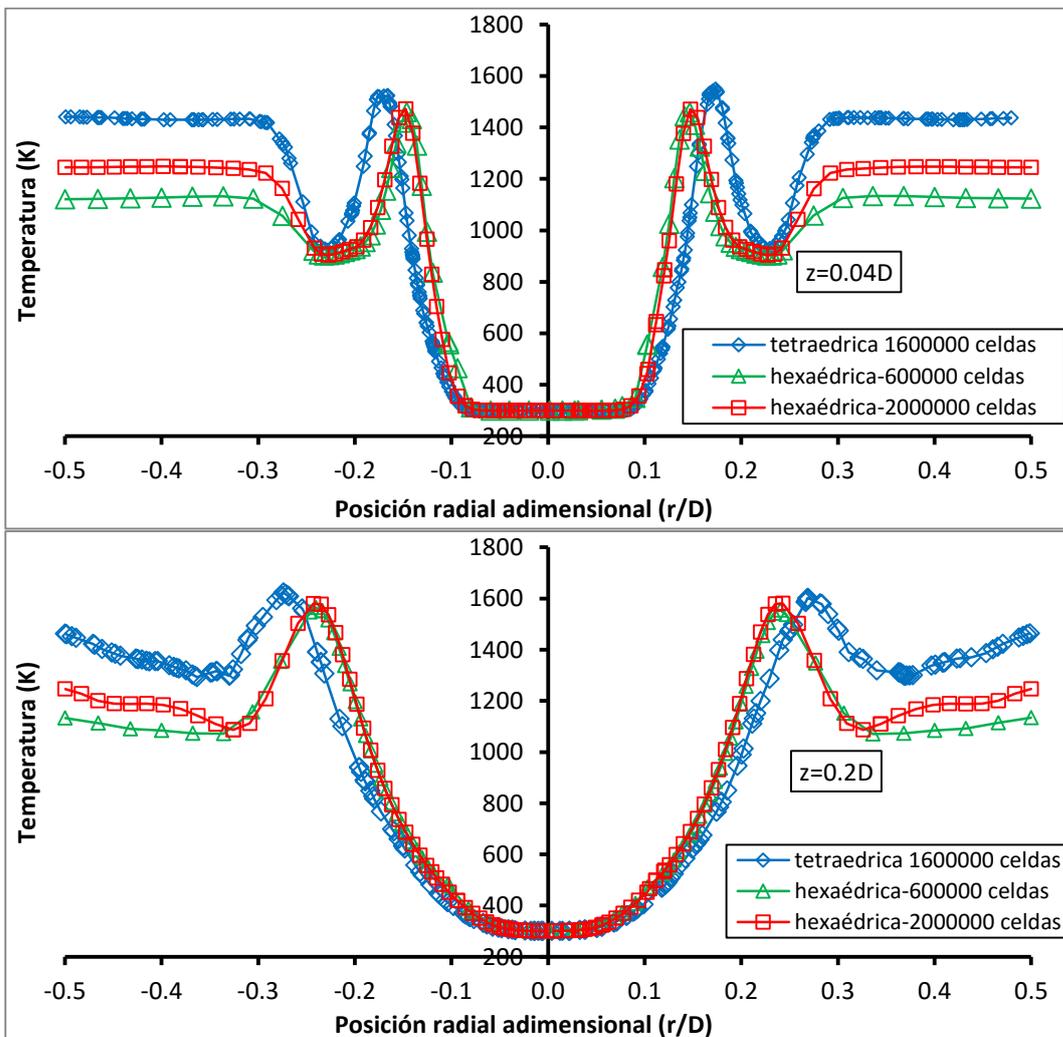


Figura 6-3 Perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para dos mallas hexaédricas y una tetraédrica para posiciones axiales de 0.04D (sup.) y 0.2D (inf.).

6.2.6 Casos analizados, hardware y software

Los casos han sido resueltos en un clúster de cálculo con Ansys Fluent. La resolución temporal del modelo EDC (incluye cinética química) es compleja, por lo que se requiere una mayor capacidad de cálculo. Todos los casos incluyen un generador de swirl con aletas curvas.

La Tabla 6-7 muestra los modelos geométricos y numéricos simulados en este capítulo. Se incluye la identificación de cada caso, las celdas y malla empleadas, el ángulo de salida, el número de swirl, el modelo de combustión, el ángulo del difusor y el dosado.

Para el estudio del patrón de flujo (apartado 6.4), se usan el caso C1 y C10. El análisis de sensibilidad del número de swirl, se realizan estudiando los casos C8, C9 y C10. Los casos C7, C10 y C14 se realizan con el objetivo de estudiar la influencia del dosado mientras que los casos C11, C12 y C13 se simulan para evaluar la influencia del difusor.

Tabla 6-7 Modelos geométricos y numéricos simulados

Id. Mod.	Celdas (10⁶)	Malla	Ang. salida (°)	Swirl	Modelo combustión	Áng. dif. (°)	Dosado
C1	1.66	HEX.	72	1.1	Isotermo	90	-
C2	1.66	HEX.	72	1.1	Sin reacción	90	0.75
C3	2.3	HEX.	72	1.1	ED	90	0.75
C4	1.66	HEX.	72	1.1	EDC 1 reacción	90	0.75
C5	1.66	HEX.	72	1.1	EDC 2 reacciones	90	0.75
C6	1.66	HEX.	72	1.1	EDC 4 reacciones	90	0.75
C7	2.3	HEX.	72	1.1	PDF	90	0.75
C8	2.3	HEX.	30	0.2	PDF	90	1
C9	2.3	HEX.	57	0.6	PDF	90	1
C10	2.3	HEX.	72	1.1	PDF	90	1
C11	1.6	TET.	72	1.1	PDF	30	1
C12	1.6	TET.	72	1.1	PDF	60	1
C13	1.6	TET.	72	1.1	PDF	90	1
C14	2.3	HEX.	72	1.1	PDF	90	1.25

6.3 Estudio modelos de combustión

El estudio del patrón de flujo reactivo y los análisis de sensibilidad requieren de un modelo de combustión robusto y validado, por lo que se realiza una comparativa con los modelos de combustión más significativos del código Ansys Fluent empleando técnicas RANS. Los modelos analizados son los siguientes modelos:

- Modelo no reactivo isotermo (C1, capítulo 3)
- Modelo no reactivo con mezclado y transferencia de calor (C2)
- Modelo de combustión Eddy Dissipation con 6 componentes (C3)
- Modelo de combustión Eddy Dissipation Concept con una reacción (C4)
- Modelo de combustión Eddy Dissipation Concept con dos reacciones (C5)
- Modelo de combustión Eddy Dissipation Concept con cuatro reacciones (C6)
- Modelo de combustión PDF con 20 componentes (C7)

Se analizan casos con un número de swirl alto ($S=1.1$) para observar las características más importantes del flujo rotante. Además, los mecanismos de reacción simplificados seleccionados funcionan mejor para dosados bajos, por lo que se considera un dosado de 0.75. Primeramente se presentan los contornos de velocidad y temperatura (Figura 6-4 y Figura 6-5).

Se encuentran diferencias significativas entre el flujo isotermo y el resto. En los modelos que consideran flujo reactivo la IRZ disminuye, ya que las velocidades axiales aumentan (Figura 6-4). El efecto de reducción de la IRZ se debe a la temperatura. El modelo que considera transferencia de calor sin flujo reactivo presenta una reducción ligera de la IRZ. La tendencia se vuelve más acusada cuanto mayor es la temperatura.

En el apartado 6.4.1 se analizan de forma más detallada las diferencias entre el flujo reactivo e isotermo.

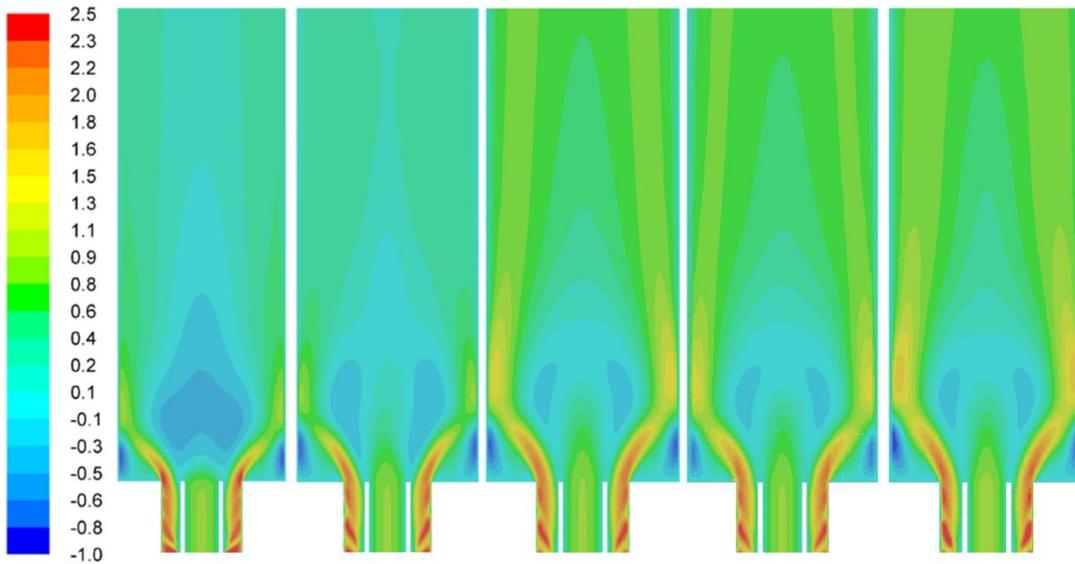


Figura 6-4 Contornos de velocidad axial (m/s) para los casos isotermo, sin reacción, ED, EDC de una reacción, PDF (de izquierda a derecha).

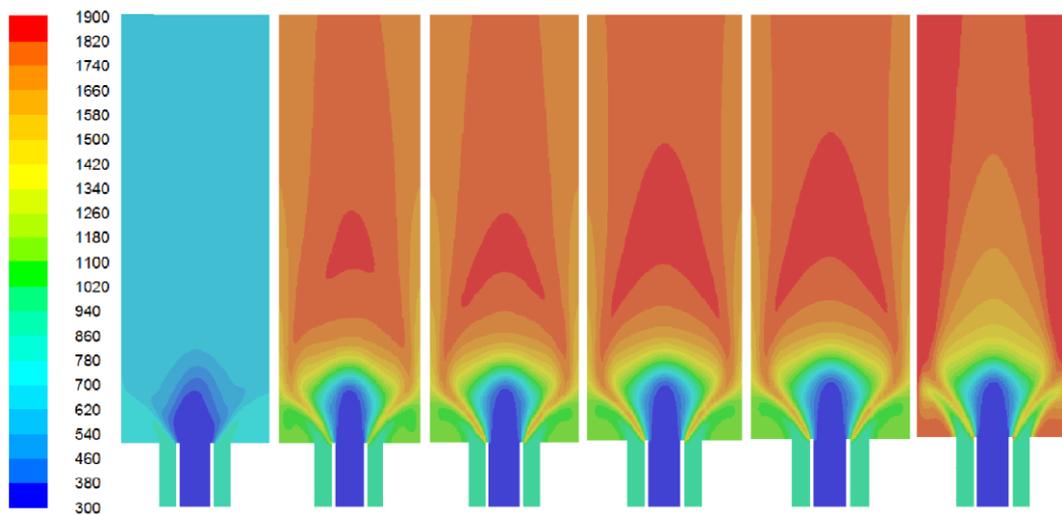


Figura 6-5 Contornos temperatura (K) para los casos sin reacción, ED, EDC con una reacción, EDC con dos reacciones, EDC con cuatro reacciones y PDF (de izquierda a derecha).

Las velocidades axiales de los casos reactivos son muy similares. No se muestran los contornos de velocidad de los modelos EDC de dos y cuatro reacciones puesto que las velocidades son idénticas a los de una reacción. Se podría concluir que un aumento de las temperaturas considerable, reduce la IRZ y las velocidades axiales.

El análisis de temperaturas (Figura 6-5) pone de manifiesto que el modelo ED proporciona las menores temperaturas. Las temperaturas relativas a los modelos EDC son intermedias, mientras que las del modelo PDF son las superiores. La zona de la llama en todos los casos se ubica en la capa de cortadura. Los modelos ED y EDC dan lugar a llamas mucho más compactas que el modelo PDF. Además predicen una homogeneización más rápida de la temperatura que el modelo PDF. La ORZ tiene temperaturas más altas en el modelo PDF. Las zonas de altas temperaturas se ubican cerca de las paredes en el modelo PDF, mientras que los demás modelos éstas se localizan en el interior.

En la Figura 6-6 se muestran las iso-líneas de velocidad axial nula con el objeto de mostrar los centros de las zonas de recirculación interior y exterior. Se indican éstas para los modelos reactivos ED, EDC, PDF. Adicionalmente se incluyen las relativas a un modelo no reactivo isoterma y a otro modelo no reactivo con transferencia de calor y mezclado denominado “sin reacción”.

Las tendencias de reducción de la IRZ, se pueden apreciar claramente. Ésta disminuye cuando aumenta la temperatura. Incluso en el modelo no reactivo con transferencia de calor se observa una ligera disminución del tamaño axial de ésta. A medida que aumenta la temperatura, la IRZ va disminuyendo hasta que dejar de tener forma de bulbo. La forma pasa a ser toroidal como se observa en los resultados del modelo PDF. El incremento de temperatura indica un pequeño aumento en el tamaño de la ORZ.

Existe una pequeña asimetría debida a oscilaciones numéricas en la solución en el caso no reactivo con transferencia de calor. No se muestran las iso-líneas de velocidad axial nula en los casos EDC de dos y cuatro reacciones puesto que son idénticas a los de una reacción.

Se analizan parámetros globales como la temperatura y la velocidad axial, en función de la posición axial, para los cinco casos analizados en la Figura 6-7 y la Figura 6-8.

El modelo PDF estima mayores temperaturas a partir de una posición axial de 3D y no predice un alto gradiente térmico en el eje. Ésto se debe a que la IRZ adquiere forma de bulbo y por consiguiente la también la llama, generándose un mayor gradiente de temperaturas radial.

La misma tendencia, de disminución de la IRZ, se aprecia en el análisis de velocidades. Además, el modelo presenta mayores velocidades axiales que el resto a partir de posiciones axiales mayores a 2.5D.

Se muestra en la Figura 6-8 cómo el perfil de velocidades axial no corta al eje de abscisas por lo que ésta es otra evidencia de que la IRZ no tiene forma de bulbo, sino

toroidal. Los modelos ED y EDC de una reacción son casi coincidentes en los perfiles axiales de temperatura y velocidad axial. No se muestran resultados de los modelos EDC de dos y cuatro reacciones puesto no se encuentran diferencias significativas respecto al modelo EDC de una ecuación.

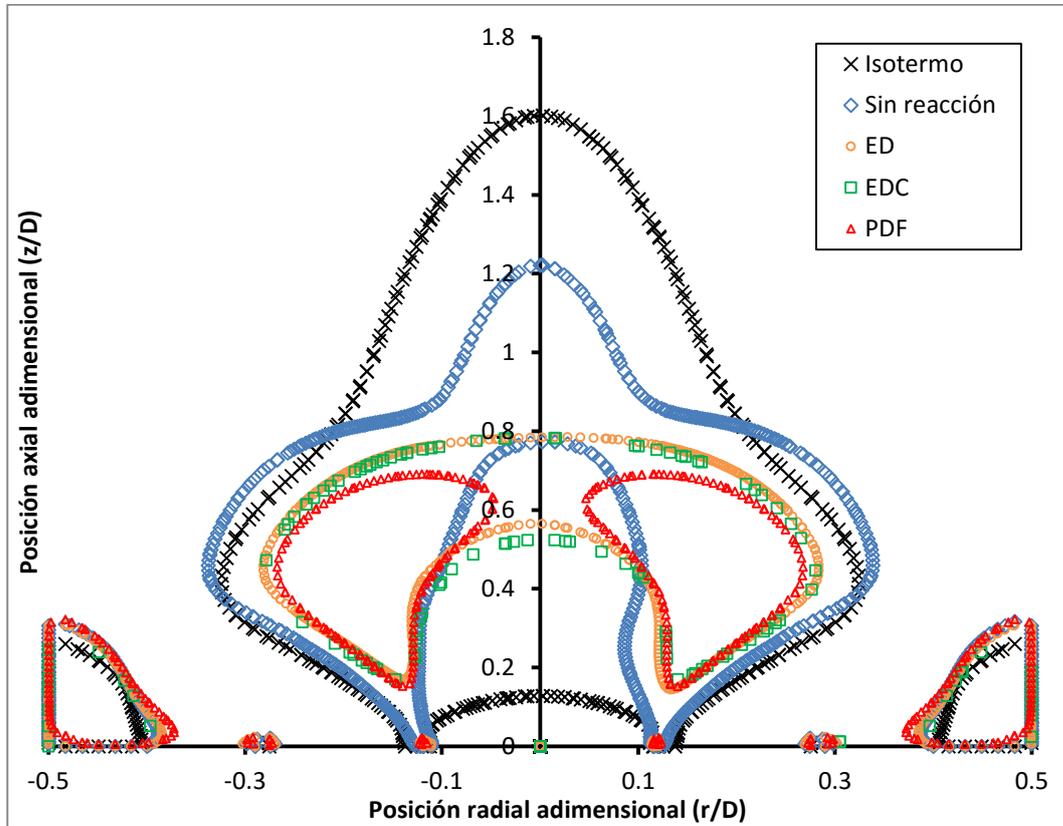


Figura 6-6 Isolíneas de velocidad axial nula para los modelos de combustión ED, EDC, PDF sin reacción e isotermo $S=1.1$.

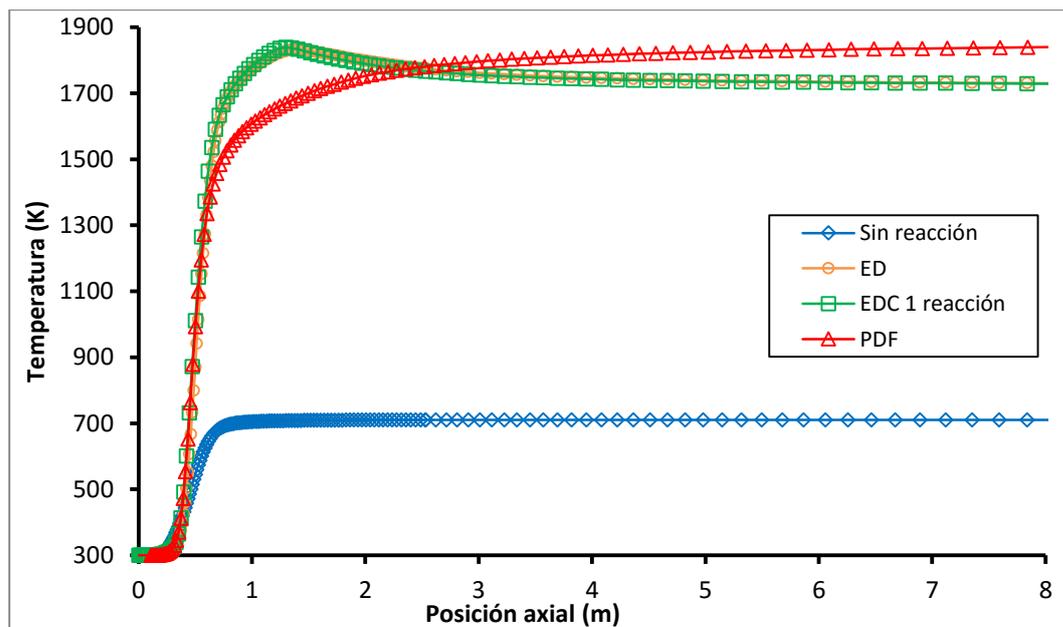


Figura 6-7 Temperatura en función de la posición axial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y sin reacción. $S=1.1$

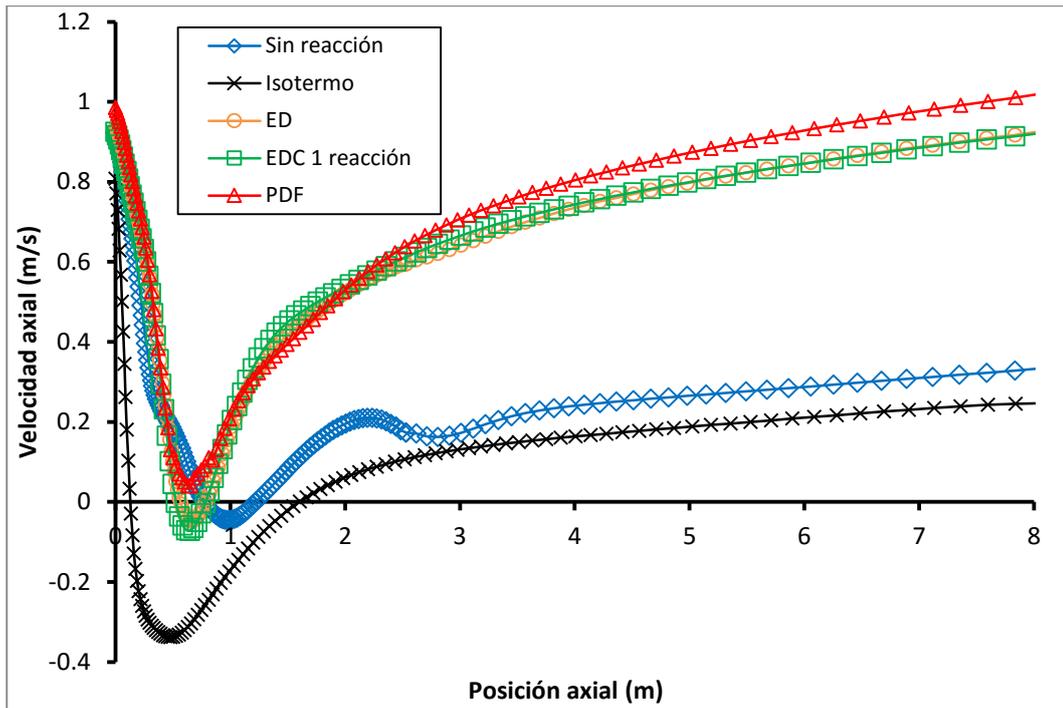


Figura 6-8 Velocidad axial en función de la posición axial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF sin reacción e isotermo $S=1.1$

Se analizan las velocidades axiales (Figura 6-9) y la temperatura (Figura 6-10) en función de la posición radial para varias posiciones axiales (5, 25 y 100 mm) que corresponden con posiciones axiales adimensionales de $0.04D$, $0.2D$ y $0.82D$.

Se muestran los resultados obtenidos en los modelos PDF, EDC, ED, sin reacción e isotermo. No se indican los resultados de temperatura del modelo isotermo puesto que son triviales.

Para posiciones axiales pequeñas ($0.04D$), la velocidad axial es mayor cuanto menor es la temperatura. Esta tendencia cambia para mayores secciones axiales ($0.2D$ y $0.82D$) ya que la velocidad axial aumenta con la temperatura, al tener lugar la reacción y la expansión de los productos de combustión.

Se obtienen temperaturas significativamente más altas cerca de las paredes en el modelo PDF que en el resto de modelos.

Es importante notar que los modelos se pueden ordenar de mayor a menor temperatura máxima de la siguiente forma: PDF, EDC, ED, sin reacción e isotermo.

En posiciones axiales cerca de la entrada de la cámara de combustión los perfiles radiales de temperatura son similares, puesto que la combustión no ha tenido lugar. Para mayores posiciones axiales los modelos se diferencian por temperatura según el orden indicado anteriormente. La temperatura se homogeneiza para posiciones axiales menores en los modelos ED y EDC que en el modelo PDF.

La condición de adiabaticidad en la pared produce un gradiente de temperatura nulo cerca de la misma.

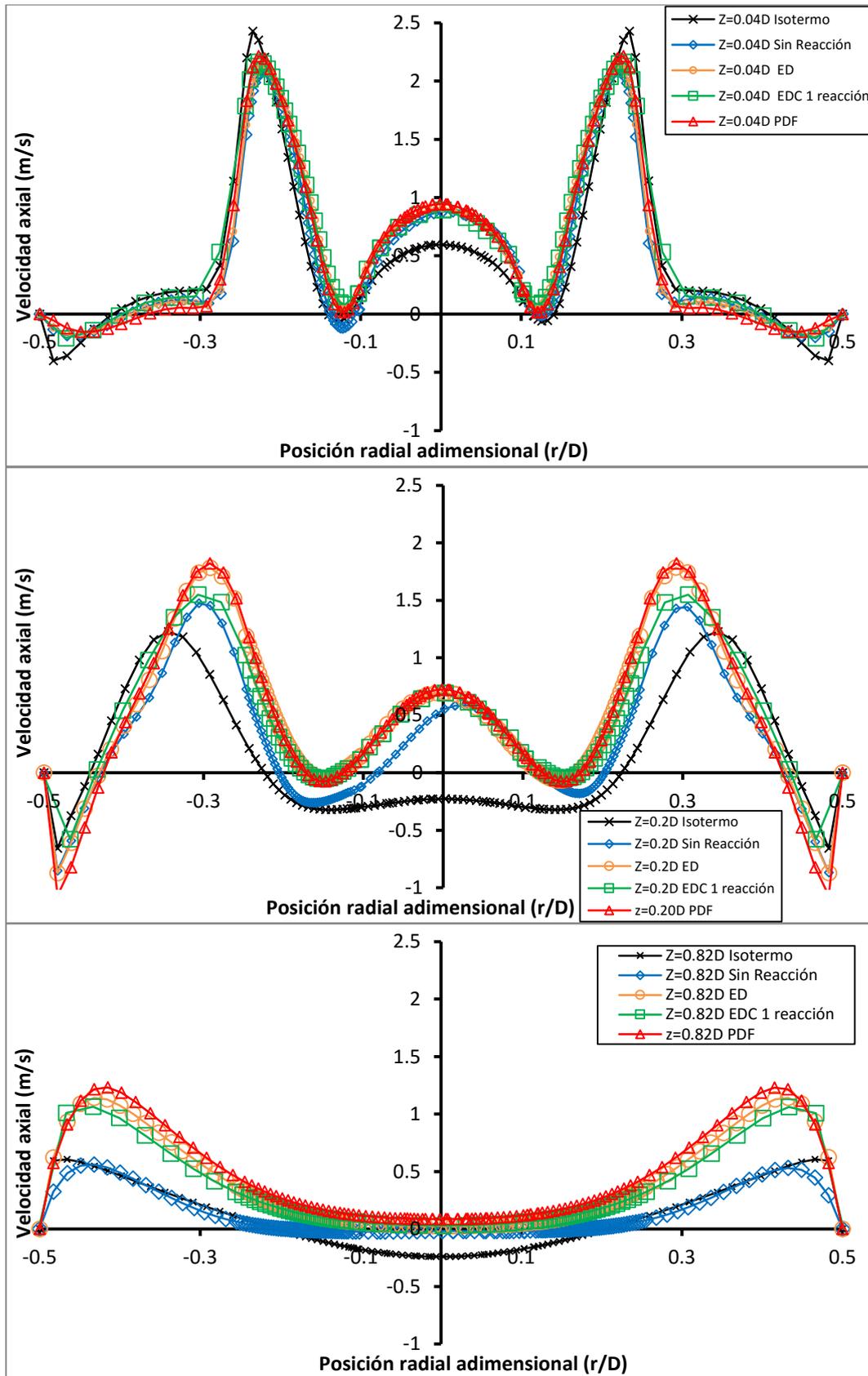


Figura 6-9 Velocidad axial en función de la posición radial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y los casos isoterms y sin reacción. $S=1.1$. Sección axiales 0.04D, 0.2D y 0.82D.

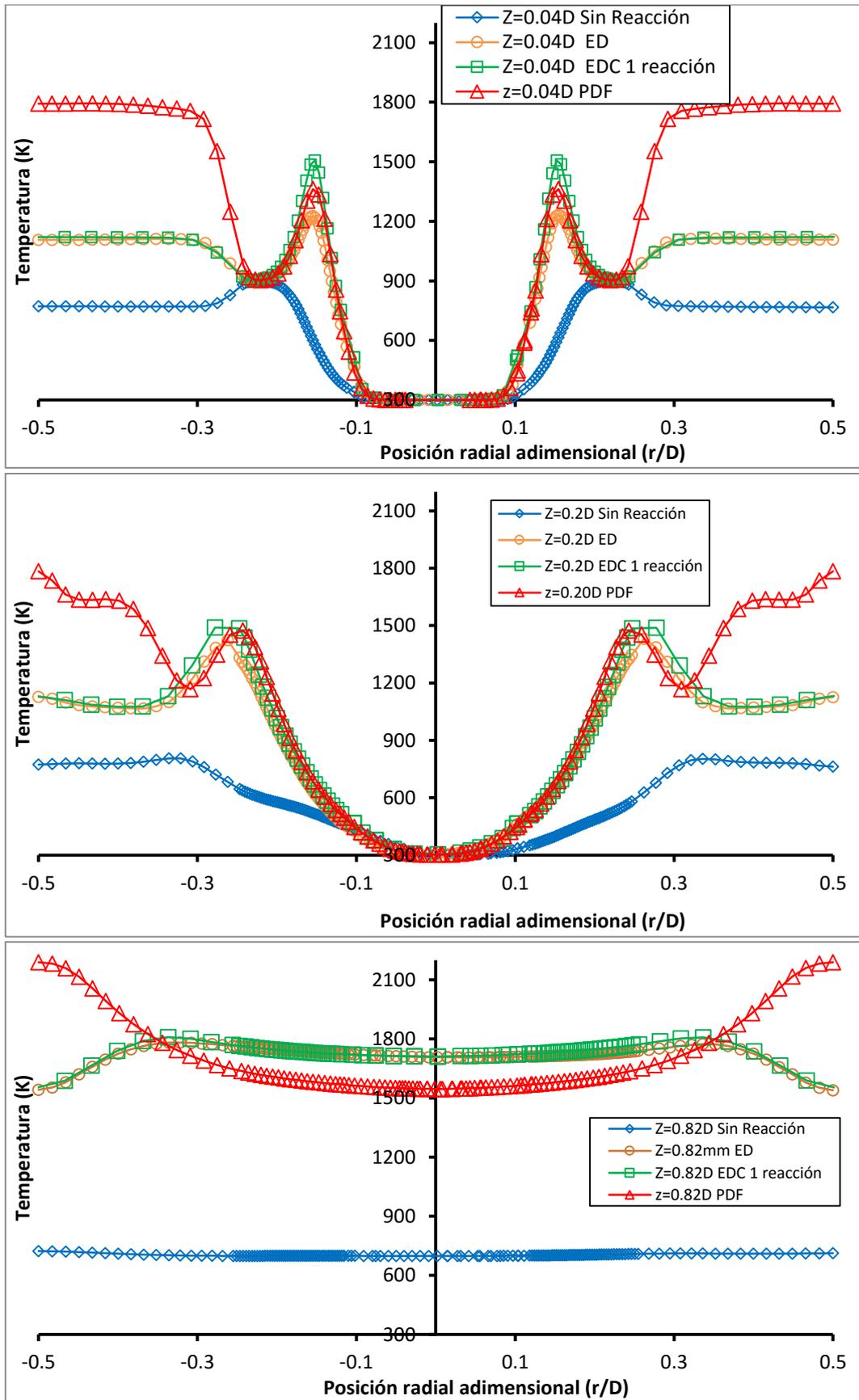


Figura 6-10 Temperatura en función de la posición radial para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y sin reacción. $S=1.1$. Sección axiales 0.04D, 0.2D y 0.82D.

6.3.1 Temperatura adiabática de llama

Para comprobar si los resultados obtenidos en la combustión son aceptables, se contrastan las temperaturas obtenidas en cada modelo frente a la temperatura adiabática de llama (Figura 6-11).

Se muestra la correlación entre la temperatura y la fracción de masa de metano para los modelos de combustión ED, EDC y PDF y el caso sin reacción. La línea roja representa el equilibrio adiabático calculado con el código unidimensional CHEMK6. Dicho código considera química GRI-MECH.

Se ha indicado anteriormente que se considera el quemador aislado térmicamente, por lo que las temperaturas más altas se dan en la parte final, a pesar de que la fracción másica de metano es menor. Con el objeto de tener una validación de la temperatura adiabática de llama fiable se muestran valores locales de temperatura en la zona cercana a la llama. En los modelos ED y EDC se seleccionan las temperaturas de las zonas desde $z=0$ hasta $z=D$. En el modelo PDF se seleccionan las temperaturas de los puntos que tienen varianza de fracción de mezcla entre 0.01 y 0.08.

La mayoría de los puntos tienen temperaturas por debajo de la adiabática, salvo en dos zonas. La primera tiene lugar únicamente en el modelo PDF. Existe una mínima zona para fracciones másicas de metano de 0.07 que supera mínimamente la temperatura de la llama probablemente por la consideración de la ganancia de calor de las tablas PDF. La segunda tiene lugar en los modelos ED, EDC y PDF. Para fracciones másicas de metano menores que 0.015, la temperatura es superior a la adiabática. Dichos puntos podrían corresponder a posiciones ligeramente exteriores a la llama por lo que probablemente hayan ganado calor.

Al ser la llama difusiva, localmente se comporta como rica o pobre. Los puntos de cada modelo representan el comportamiento local de la llama. De forma general se observa que el comportamiento local puede tener pérdidas de calor o ganancias por lo que las temperaturas pueden no ajustarse correctamente en algunos puntos.

Se aprecia que el modelo PDF proporciona una precisión buena con un coste computacional razonable, ya que no necesita resolver la cinética química. De forma general las pendientes de todos los modelos son similares.

Se propone continuar la investigación analizando el efecto que tiene en la temperatura de la llama la consideración de distintos mecanismos de reacción detallados.

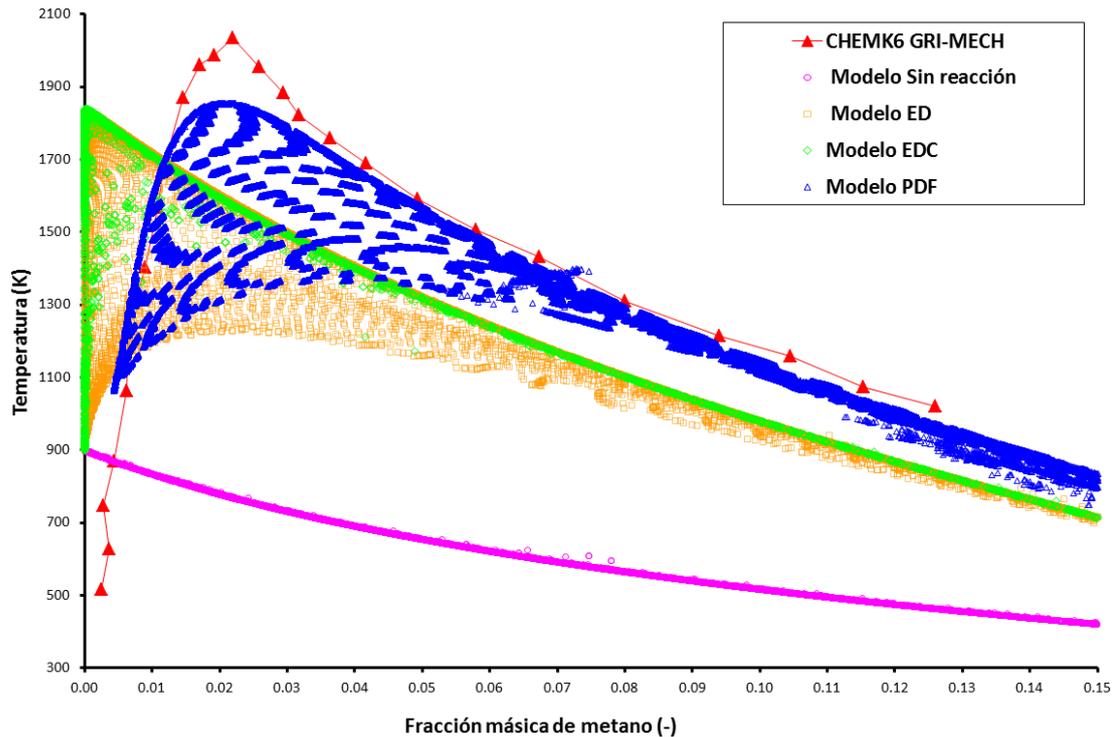


Figura 6-11 Temperatura en función de la fracción másica de metano para los modelos de combustión ED, EDC, PDF y sin reacción. $S=1.1$

6.4 Patrón de flujo reactivo y estructura de la llama

Esta sección está dedicada al estudio del patrón de flujo de los casos reactivos y el análisis de la estructura de la llama. Se ha considerado como caso modelo, el resuelto mediante el método PDF (C10, Tabla 6-7), puesto que proporciona los mejores resultados en referencia a la temperatura adiabática de llama y tiene un coste computacional razonable. Adicionalmente, se emplea el caso C1 (Tabla 6-7) para contrastar las diferencias existentes entre el flujo isotermo y el reactivo.

6.4.1 Modelo isotermo y reactivo

La comparación de casos reactivos y no reactivos, indica que en los primeros se produce una expansión de los productos de la reacción (Figura 6-12) y, a continuación, las velocidades axiales se incrementan porque balance de masa debe cumplirse.

Al quemarse el metano, aumenta la temperatura y para conservar el gasto, aumenta la velocidad axial, con lo que desaparece la IRZ para números de swirl intermedios o disminuye su tamaño para números de swirl grandes (Figura 6-12). El punto de remanso principal de la IRZ juega un papel importante, fijando la ubicación del frente de llama en quemadores. Además, los productos de combustión ayudan a calentar la mezcla fresca. La ORZ se sitúa a mayores posiciones axiales en casos reactivos que los isotermos.

Es importante notar que la consideración de casos no isotermos, reduce el número de swirl, respecto a los casos isotermos. Las condiciones de contorno son distintas. En los casos reactivos la densidad del aire precalentado (900 K), que entra

por la tobera exterior, es significativamente menor y por tanto, disminuye la cantidad de movimiento que dispone el fluido que entra con rotación. Además, la combustión incrementa este efecto, al aumentar la temperatura y por tanto, la velocidad axial para que el balance de masa se cumpla.

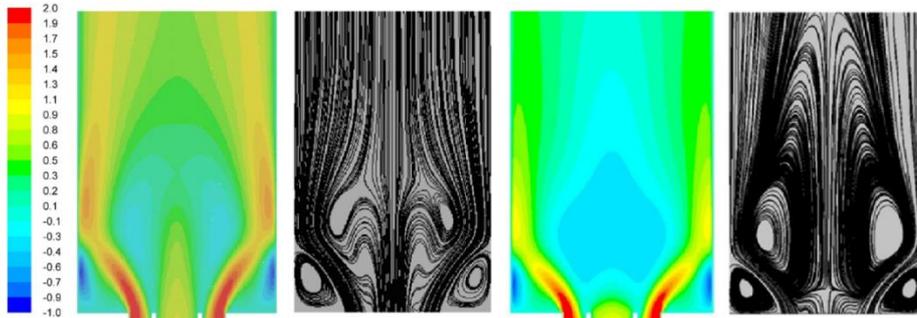


Figura 6-12 Velocidad axial y líneas de corriente proyectadas sobre una sección axial para casos reactivos (izq.) e isoterms (dcha.)

El análisis isotermo de modelos con aletas curvas con ángulos de salida 29°, 57° y 72° produce números de swirl de 0.3, 0.72 y 1.22 respectivamente. Si se analizan las mismas configuraciones geométricas mediante casos reactivos empleando el modelo PDF se obtienen números de swirl de 0.22, 0.59 y 1.1. Se obtienen reducciones del número de swirl de un 27%, 18% y 10% respectivamente.

Se puede concluir que estas reducciones del número de swirl están relacionadas con la expansión radial de los productos de combustión y el aumento de la velocidad axial y con el precalentado del aire de la tobera exterior. Se aprecia también que la reducción disminuye a medida que aumenta el número de swirl.

6.4.2 Estructura del flujo reactivo

Se realiza un estudio de las características más importantes del flujo reactivo con el modelo PDF, dosado estequiométrico y $S=1.1$. Se emplea un generador de swirl de aletas curvas y no se emplea un difusor en la expansión brusca. En la Figura 6-13 (izq.) se muestran los vectores de velocidad proyectados sobre una línea de corriente para el caso reactivo. Se muestran de forma muy clara la IRZ y la ORZ. La forma de la IRZ en los casos reactivos con modelo PDF cambia radicalmente respecto a los isoterms, ya que adquiere forma toroidal (Figura 6-13, dcha.).

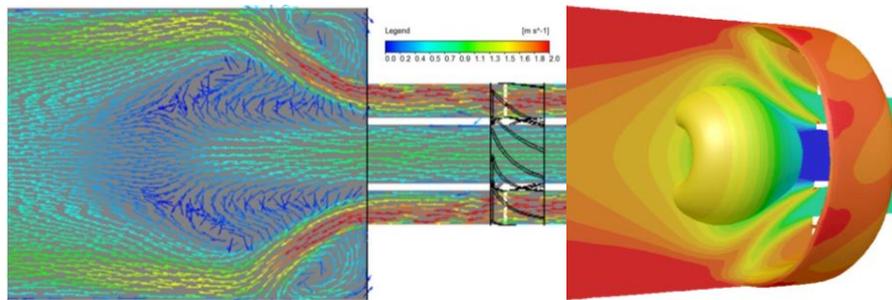


Figura 6-13 Vectores de velocidad proyectados sobre una sección longitudinal (izq.) y contornos de temperatura sobre una sección longitudinal del quemador e iso-superficies de velocidad axial nula coloreadas por temperatura (rango 300-1900°C) (dcha.)

Se muestran en la Figura 6-14 los contornos de temperatura, módulo de la velocidad y velocidad axial obtenidos mediante el modelo PDF. Se aprecian la IRZ, la ORZ y la capa de cortadura así como importantes variaciones axiales de temperatura y velocidad. Las paredes del quemador se consideran aisladas térmicamente. Esto provoca que las líneas de iso-temperatura corten aproximadamente en perpendicular a las paredes de la cámara. Si las paredes fuesen isotermas, las líneas de iso-temperatura serían paralelas al contorno. Estas características se pueden observar también en los perfiles radiales de temperatura.

Hasta una posición axial de 3D del inicio de la cámara de combustión no se alcanza una temperatura homogénea, existiendo un importante gradiente radial de temperaturas. Esto podría ocasionar problemas de NO_x debido a la baja homogeneización de la mezcla. Los contornos de velocidad y de velocidad axial ponen de manifiesto la falta de homogeneización radial del flujo.

Se aprecia en los mapas de temperatura, que la llama se sitúa capa de cortadura entre los chorros, donde se produce la mezcla. La ORZ, cerca de la pared, y la IRZ en el interior tienen alta temperatura por lo que ayudan a calentar la mezcla fresca.

La Figura 6-15 indica la posición de la llama a través de la energía cinética turbulenta y la varianza de la fracción de mezcla. Valores altos de éstas indican que la reacción tiene lugar.

En la Figura 6-17 se indican las iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constantes y en la Figura 6-16 las de temperatura constantes, con el objeto de identificar la forma y características de la llama. Ambas se superponen a líneas de corriente proyectadas en un plano longitudinal.

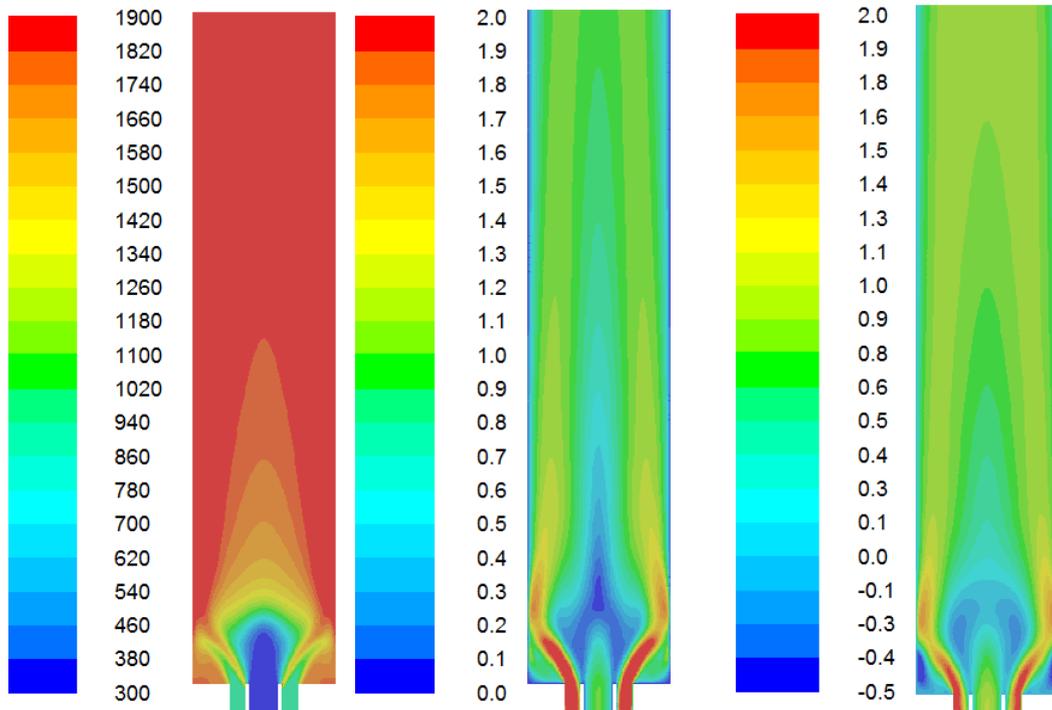


Figura 6-14 Temperatura (K) (izq.), velocidad (m/s) (centro) y velocidad axial (m/s) (dcha.). Modelo PDF. $S=1.1$

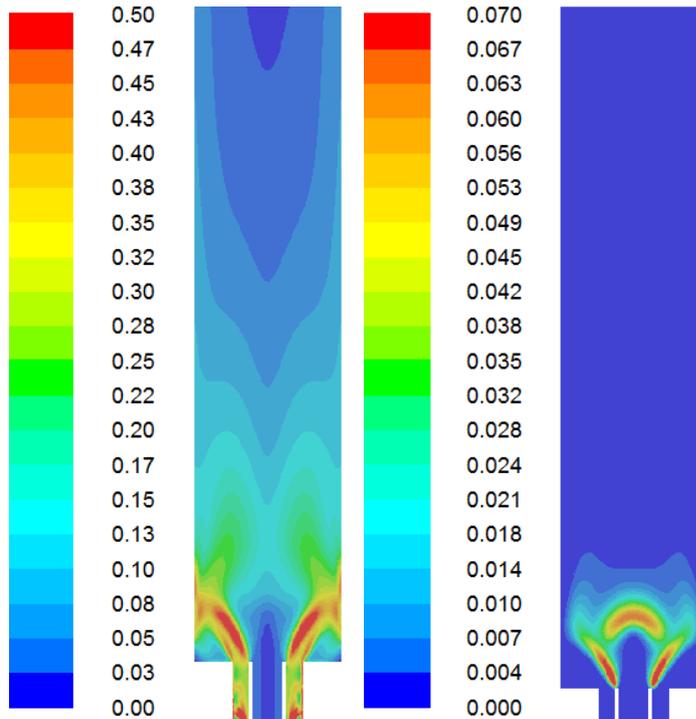


Figura 6-15 Energía cinética turbulenta (m^2/s^2) (izq.), y varianza fracción mezcla (-) (dcha.).
Modelo PDF. $S=1.1$

Las iso-superficies de la varianza de la fracción de mezcla tienen dos zonas, una interior y otra exterior que corresponden a los bordes de la llama. La reacción comienza con varianzas de fracción de mezcla altas y a medida que va disminuyendo, la reacción va finalizando y la temperatura aumentando. Además, la Figura 6-17 muestra el progreso de la reacción y el consumo de combustible.

Se comprueba como las iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constantes (Figura 6-17) se relacionan con iso-superficies de temperatura constante (Figura 6-16), ya que ésta última viene determinada por la primera.

Adicionalmente, se observa como la IRZ se asocia a los productos de reacción, mientras que la ORZ se asocia a los reactivos.

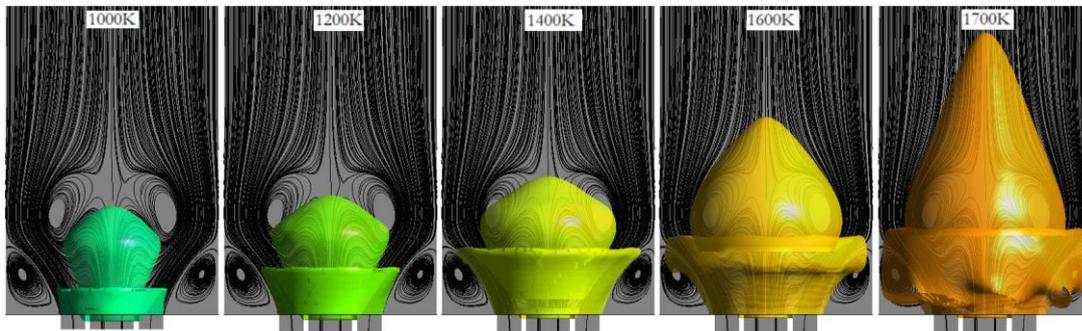


Figura 6-16 Iso-superficies de temperatura constante sobre líneas de corriente

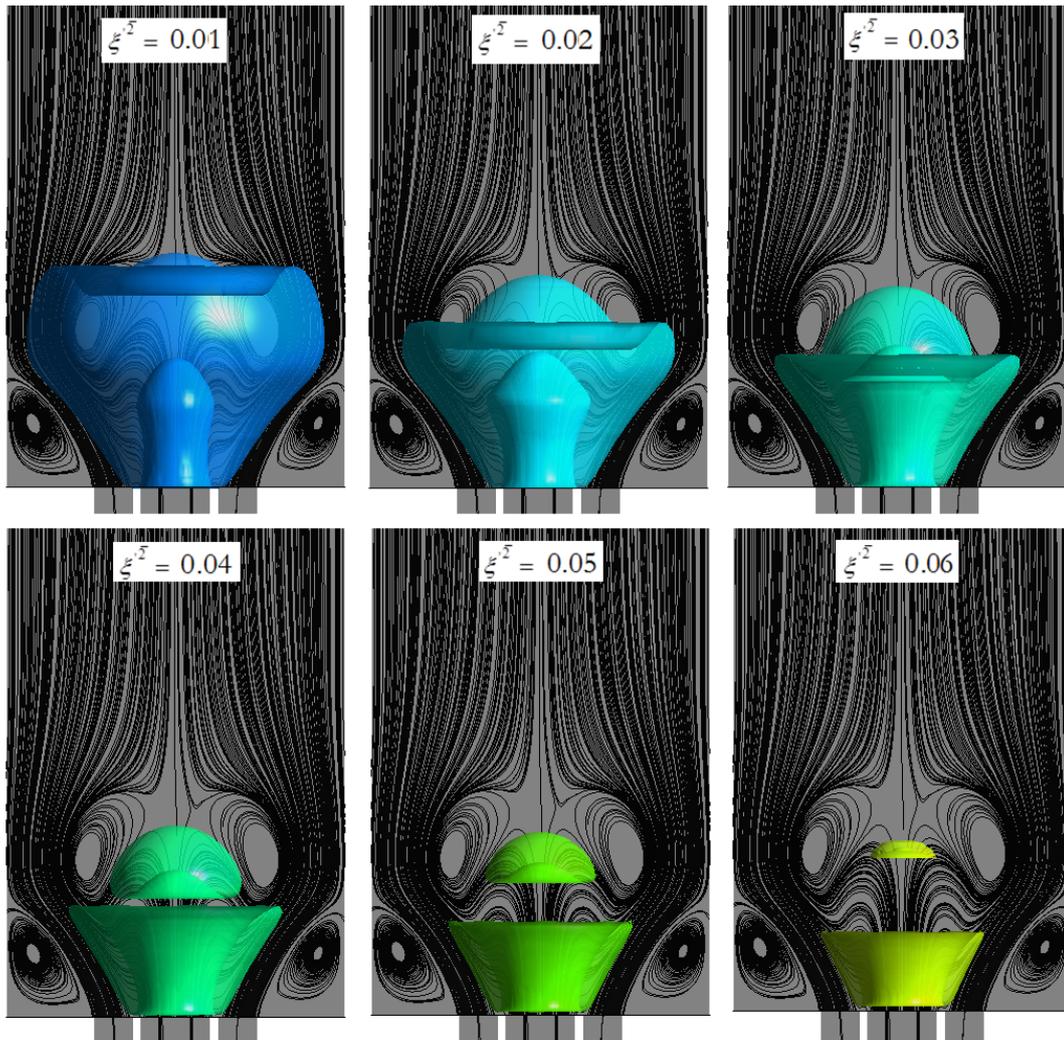


Figura 6-17 Iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constante sobre líneas de corriente

De forma análoga a los casos isotermos, en los que se empleaban las zonas de velocidad axial nulas para indicar las recirculaciones interior y exterior, la varianza de mezcla puede ser una herramienta numérica indicativa de las zonas de reacción o posición de la llama. La Figura 6-18 muestra iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constantes en función de la posición axial y radial, apreciándose de forma clara la posible ubicación de la llama.

La llama se ubica en las zonas de varianza de fracción de mezcla altas (0.07-0.09) y adquiere la forma de la capa de cortadura. A medida que el combustible se consume, la zona de reacción va cambiando de forma toroidal a forma de bulbo.

La varianza de la fracción de mezcla puede indicar el progreso de la reacción, pudiéndose comprobar que se ha producido la combustión de la mayor parte de metano entre posiciones axiales adimensionales 0 y 0.7D.

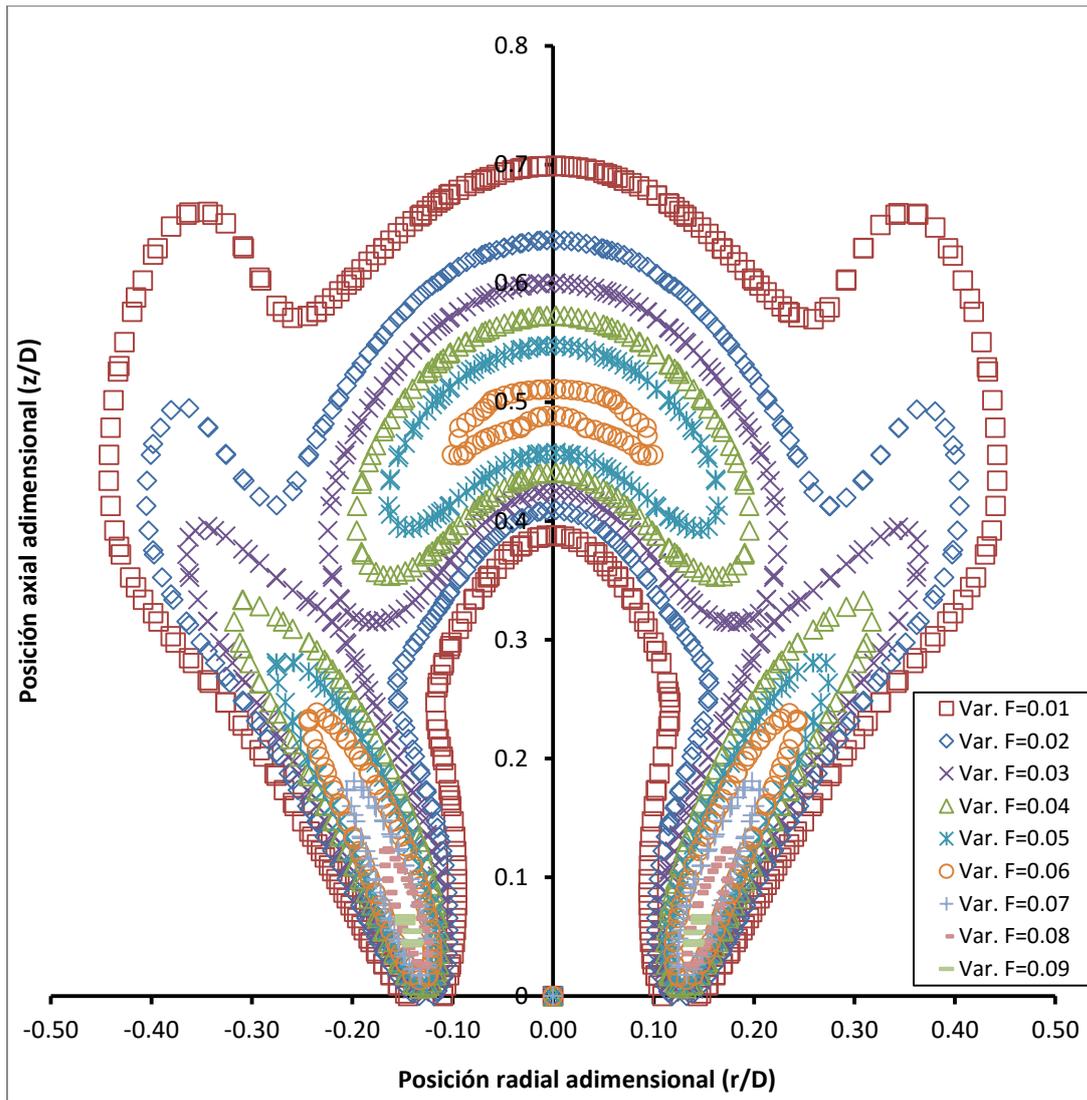


Figura 6-18 Iso-superficies de varianza de fracción de mezcla constantes en función de la posición axial y radial adimensionales

A continuación, se indican los contornos de fracción másica de las especies más significativas. Los contornos de fracción másica de O_2 y de H_2O se muestran en la Figura 6-19. Los contornos de fracción másica de O_2 muestran el progreso de la combustión en dirección axial y radial. Se aprecia que la ORZ se forma de O_2 ya que la reacción no se ha producido. Como la combustión se produce en posiciones radiales medias del quemador, queda O_2 en la parte exterior del mismo. Todo el O_2 se ha consumido para una posición axial adimensional de D , ya que se considera dosado estequiométrico y alto número de swirl.

La tendencia inversa ocurre con el componente H_2O que se comienza a generar a medida que la combustión progresa. Adicionalmente se deduce que la reacción tiene lugar de forma mayoritaria para una posición axial adimensional de D .

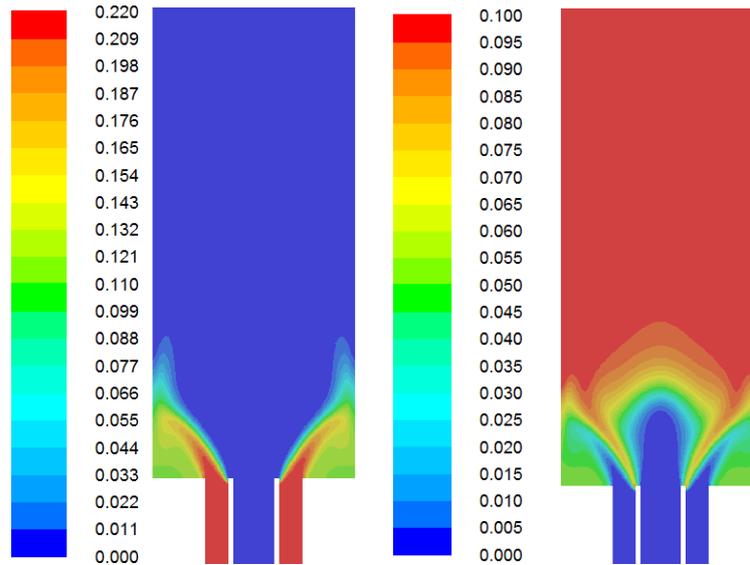


Figura 6-19 Contornos de fracción másica de O_2 (izq.) y de H_2O (dcha.). Modelo PDF. $S=1.1$

La Figura 6-20 muestra los contornos de fracción másica de NO_2 , de NO y N_2O . Se aprecia cómo las emisiones de NO_x son significativamente mayores en la zona exterior del quemador y concretamente en la ORZ, ya que es una zona de alta temperatura y se compone productos de reacción.

Los valores de dichas especies son relativamente altos, probablemente debido a no considerar radiación y establecer las paredes como adiabáticas. Esto puede generar temperaturas significativamente superiores, de forma poco realista y por consiguiente, tener una generación de NO_x mayor. Para poder establecer conclusiones acerca de las emisiones de NO_x se recomienda emplear un tratamiento adiabático e incluir la radiación en los modelos de simulación.

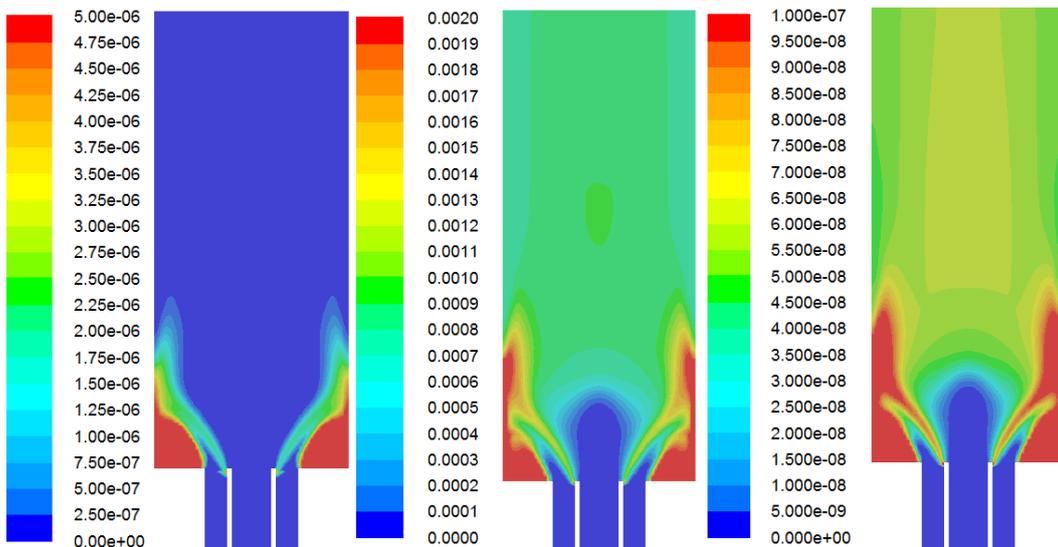


Figura 6-20 Contornos de fracción másica de NO_2 (-) (izq.) y de NO (centro) y N_2O . Modelo PDF. $S=1.1$.

La Figura 6-21 incluye los contornos de fracción másica de CH_4 , CO y CO_2 poniendo de manifiesto el consumo de combustible y una combustión ligeramente incompleta. La mayor parte del combustible se consume, ya que el dosado es estequiométrico.

Se obtiene que la IRZ tiene la función de fijar la posición del frente de llama y por lo tanto, está compuesta principalmente por productos de reacción.

Se deduce de la Figura 6-19 y la Figura 6-21 la relación entre el CO , CO_2 y O_2 obteniéndose que la producción de CO_2 es mayor en las paredes del quemador y en la ORZ mientras que la de CO en el interior. Se produce CO , ya que la combustión no es completa.

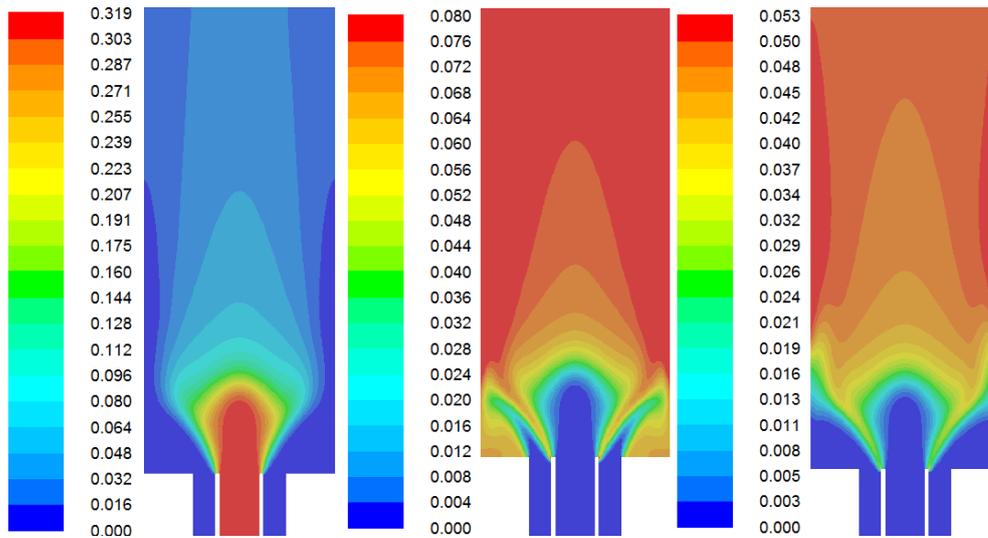


Figura 6-21 Contornos de fracción másica de CH_4 (izq.) CO_2 (centro) y de CO (dcha.). Modelo PDF. $S=1.1$

Una vez analizados los contornos de las variables más significativas, se estudian los perfiles de velocidad y temperatura en dirección radial para varias posiciones axiales.

Las posiciones axiales consideradas son 5, 25, 50, 100, 150, 200 y 300 mm que corresponden a los posiciones axiales adimensionales de 0.04D, 0.2D, 0.41D, 0.82D, 1.23D, 1.64D y 2.45D.

Los perfiles son suaves, debido a que el estado termodinámico local de la llama proporcionada por el modelo de combustión PDF es ponderado y basado en la función de probabilidad beta. También el modelo de turbulencia es RANS lo que significa que el campo de flujo se promedia en el tiempo.

En la Figura 6-22 se muestran los perfiles de temperatura en función de la posición radial para varias secciones axiales.

Se aprecia que las temperaturas son uniformes, para posiciones radiales y axiales pequeñas, debido que están considerablemente influenciadas por las condiciones de contorno. A medida que la posición radial crece, la temperatura va incrementándose

hasta el pico en el que tiene lugar la reacción. Para posiciones grandes axiales, la reacción ya ha tenido lugar y se obtienen perfiles de temperatura mucho más uniformes. Debido a la condición de adiabaticidad, la temperatura aumenta desde el interior al exterior del quemador.

En la Figura 6-23 se muestran los perfiles de velocidad axial en función de la posición radial para varias posiciones axiales.

Para posiciones radiales y axiales pequeñas, las velocidades axiales son similares a las del chorro de la tobera central. Para mayores posiciones radiales, se aprecian los picos de velocidad axial de la zona de cortadura. Cuando la posición axial crece, las velocidades axiales disminuyen y se uniformizan considerablemente.

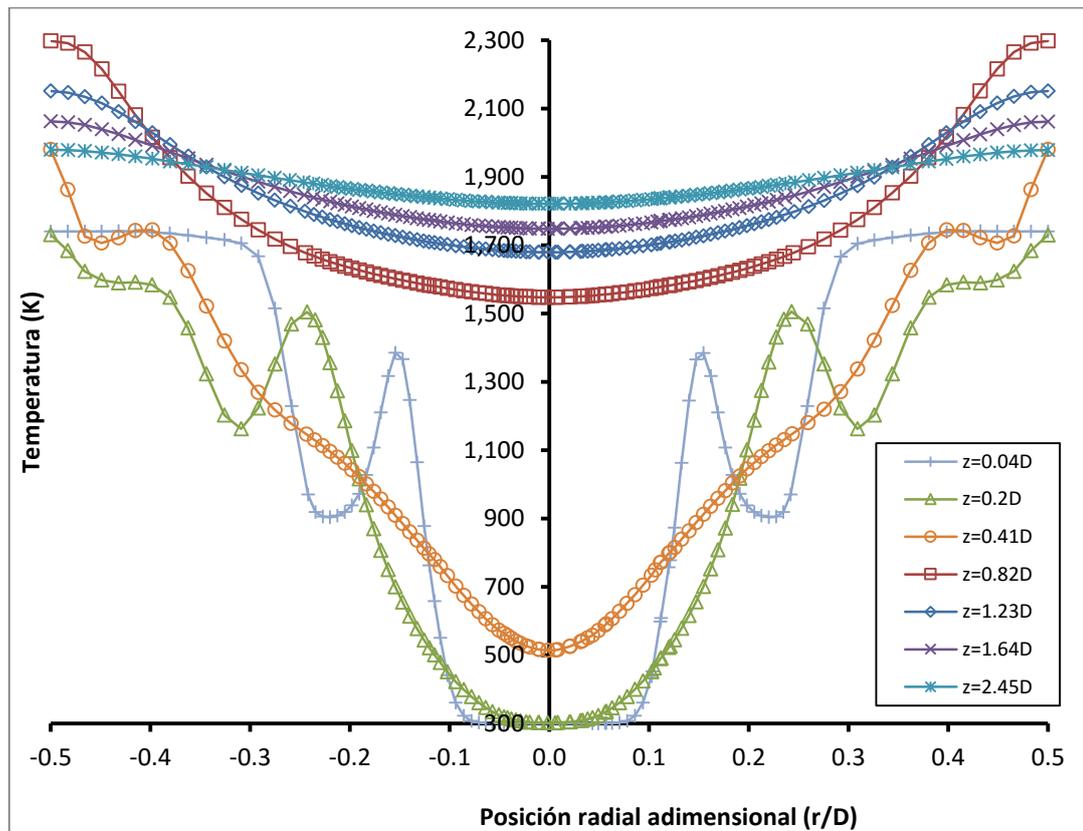


Figura 6-22 Perfiles de temperatura en función de la posición radial para varias secciones axiales. Modelo PDF. $S=1.1$

Una vez analizados los perfiles radiales de velocidad y temperatura, se estudian los perfiles axiales. Se muestran en la Figura 6-24 la temperatura y la velocidad axial en función de la posición axial. No se alcanzan valores altos de temperatura puesto que, se está representando los valores en función del eje del quemador. Éste no pasa a través de la zona de la llama, ya que como se ha comentado anteriormente la llama, la capa de cortadura y la IRZ tienen forma toroidal. La pendiente máxima de las temperaturas identifica el frente de llama. El aumento de velocidad axial se debe al cambio de temperatura por la combustión.

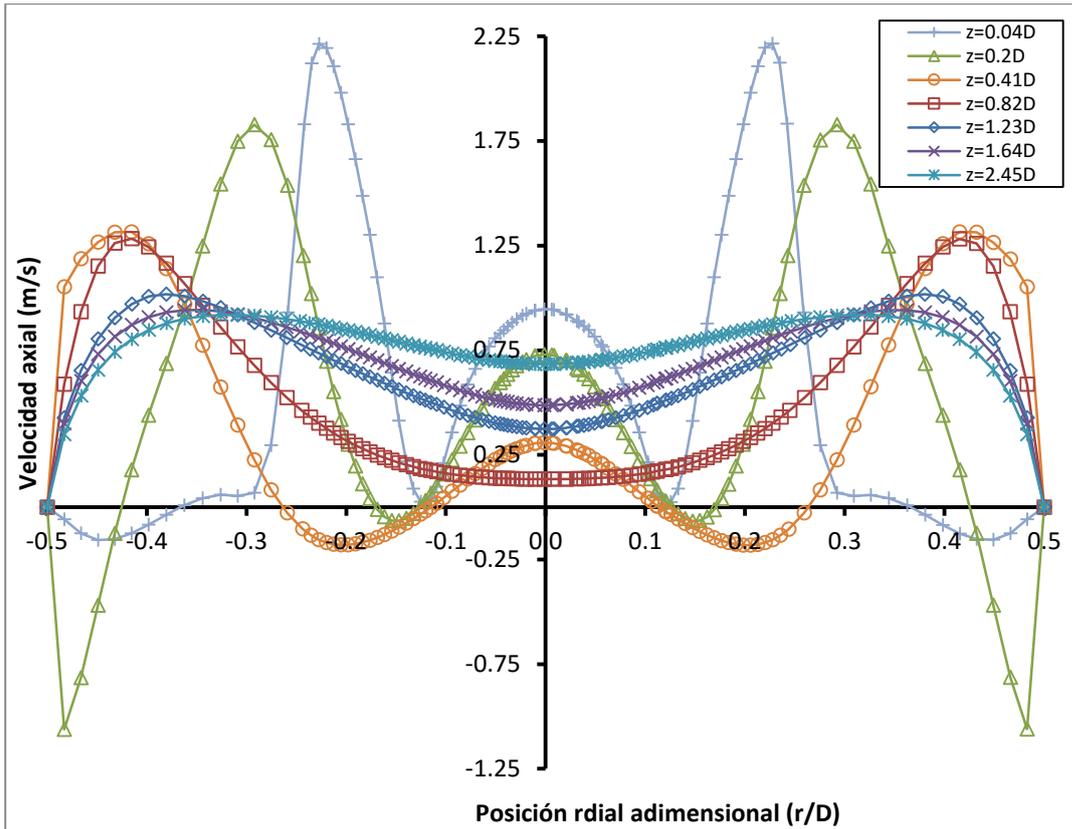


Figura 6-23 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial para varias secciones axiales. Modelo PDF. $S=1.1$

La Figura 6-25 muestra los perfiles de presión estática y tasa de disipación de energía cinética turbulenta en función de la posición axial. El punto de presión mínima coincide con el inicio de la reacción. A medida que la reacción tiene lugar, se produce una expansión que hace que la presión se incremente progresivamente. Se puede considerar que la tasa de disipación de energía cinética turbulenta y la presión son buenos indicadores de la zona de combustión.

La Figura 6-26 muestra la varianza de la fracción de mezcla en función de la posición axial. Este indicador es el más claro del progreso de la reacción. La reacción tiene lugar mayoritariamente en una longitud axial de $0.5D$. Aproximadamente todo el combustible se ha consumido en la posición axial $2D$.

En las Figura 6-27 y Figura 6-28 se muestran las fracciones de mezcla de las especies mayoritarias (CH_4 , CO_2 , H_2O , N_2 , O_2 , CO y NO) en función de la posición axial adimensional.

A pesar de que el dosado es estequiométrico, la combustión no tiene lugar de forma completa, quedando una parte de metano sin consumir. La fracción másica de metano a la salida es de 0.025 . El perfil axial de fracción másica de metano es similar a la varianza de la fracción de mezcla, ya que ésta última determina las propiedades de la llama. Los generación de CO_2 y H_2O tienen lugar desde la entrada de la cámara de combustión hasta aproximadamente una posición axial de D .

Es importante notar que el perfil axial de fracción másica de O_2 es aproximadamente nulo. El O_2 entra por la tobera exterior y se consume casi completamente, por lo que en el eje no existe dicho componente. Lo mismo sucede con el N_2 . Este componente entra por la tobera exterior por lo que para posiciones axiales pequeñas la fracción másica es nula.

La generación de CO y NO se produce hasta posiciones axiales de D. Las diferencias entre las emisiones en la parte central y la parte exterior son significativas. La comparación entre los contornos de fracción másica de especies (Figura 6-20 y Figura 6-28) y los perfiles axiales ponen de manifiesto dicha diferencia.

Se obtienen valores de NO significativamente altos, probablemente debido a las elevadas temperaturas ocasionadas por la compacidad de la cámara, el carácter adiabático de ésta y por no considerar radiación.

Se propone como trabajos futuros la consideración de una cámara de combustión más grande, para que no se produzcan temperaturas tan altas, además de emplear transferencia de calor por las paredes del quemador, así como considerar un mecanismo de radiación detallado como el de ordenadas discretas.

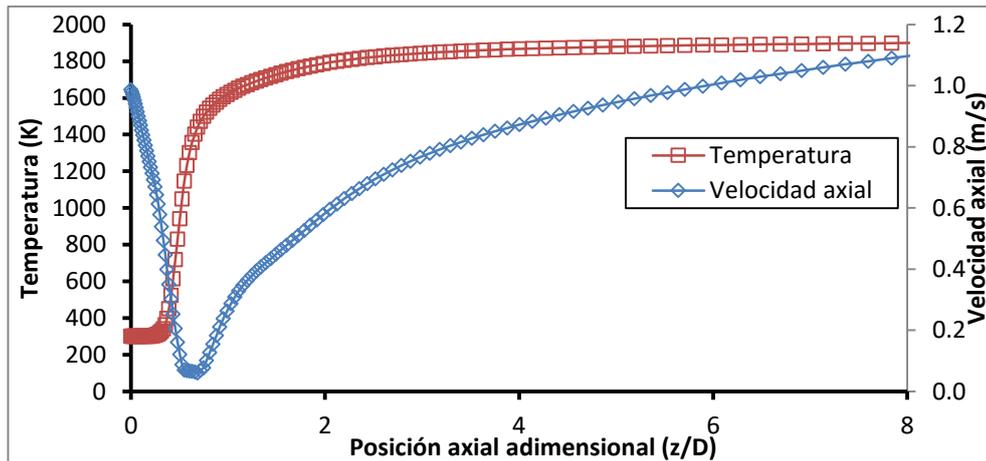


Figura 6-24 Perfiles de velocidad (eje primario) y temperatura (eje secundario) en función de la posición axial. Modelo PDF. $S=1.1$

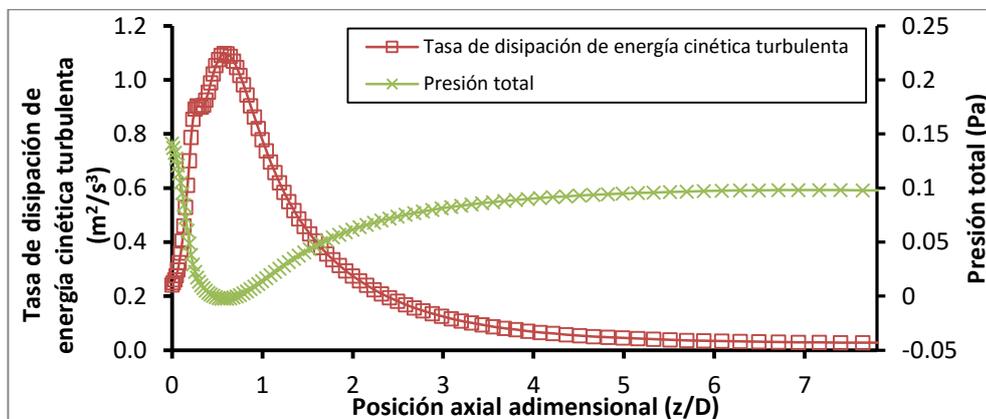


Figura 6-25 Perfiles de presión estática y energía cinética turbulenta (eje primario) y tasa de disipación turbulenta (eje secundario) en función de la posición axial. Modelo PDF. $S=1.1$

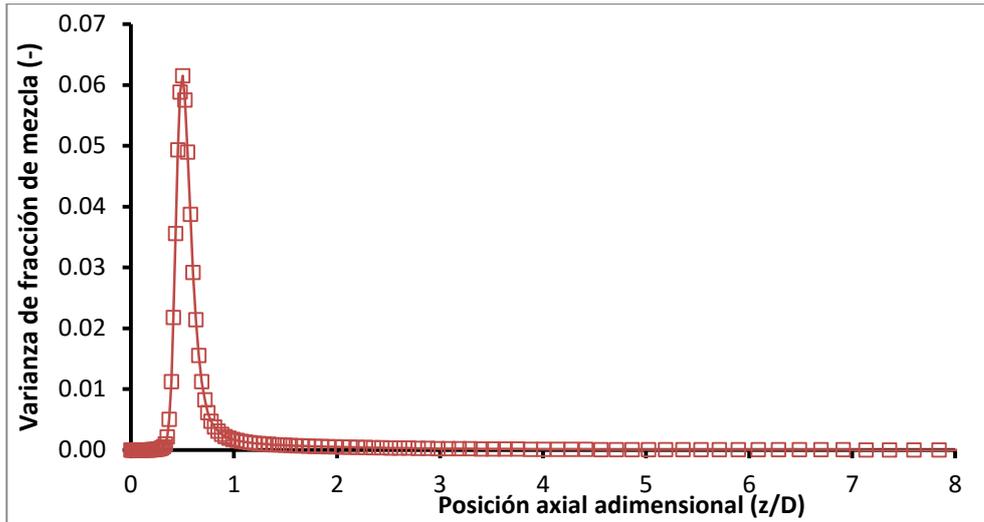


Figura 6-26 Perfiles de media de la fracción de mezcla (eje primario) y varianza de la fracción de mezcla (eje secundario) en función de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1

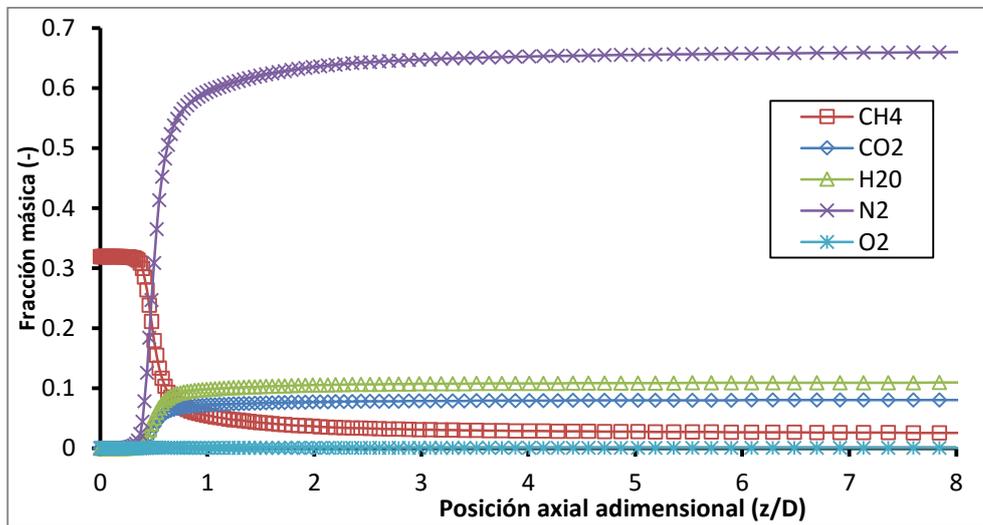


Figura 6-27 Perfiles de fracción másica de CH₄, CO₂, H₂O, N₂ y O₂ en función de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1

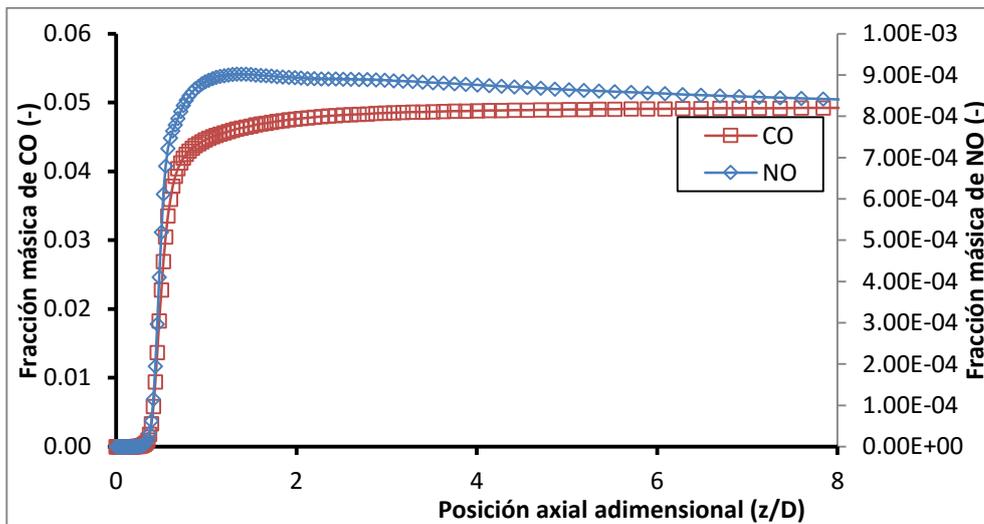


Figura 6-28 Perfiles de fracciones másicas de CO y NO de la posición axial. Modelo PDF. S=1.1

Aunque la llama es una estructura tridimensional de revolución que queda confinada entre la IRZ y la ORZ, en la capa de cortadura, se intentará dar una estimación de la posición axial de ésta según algunos criterios (Tabla 6-8).

Se puede apreciar cómo el criterio nº 1 produce una ubicación incorrecta de la llama, debido a que las mayores temperaturas se producen en la parte final del quemador porque no existen pérdidas de calor ni radiación. Este método no sería aceptable en este caso. Sí podría emplearse en dirección radial estableciéndose que la llama se sitúa entre posiciones radiales de 0.15D y 0.35D.

Los criterios 4 y 5 producen resultados sobreestimados mientras que los demás criterios predicen la zona de la llama entre posiciones axiales de 0.5 y 0.8D, un valor razonable que coincida con el que se muestra visualmente en los mapas de temperatura.

Tabla 6-8 Localización de la llama según varios criterios

Criterio	Método	Localización media (z)
1	Temperatura máxima axial	8.3D
2	Variación máxima axial de temperatura	0.5D
3	Máxima varianza axial de la fracción de mezcla	0.5D
4	80% de la temperatura máxima alcanzada axial	D
5	10% de la fracción másica de combustible	2.5D
6	Máx. grad. axial de fracción másica de combustible	0.5D
7	Máxima disipación de energía cinética turbulenta	0.8D
8	Máximo gradiente de presión axial	0.35D

6.5 Análisis de sensibilidad al número de swirl, a la estequiometría y al difusor

El modelo PDF ha presentado una buena estimación de la temperatura adiabática de llama. Además, tiene muy buena convergencia y rapidez, ya que solo requiere de la resolución de dos ecuaciones de conservación adicionales, mientras que los mecanismos simplificados requieren resolver tantas ecuaciones como especies se considere menos una, siendo además ecuaciones diferenciales no lineales y rígidas. Esto hace que sea un modelo robusto y apto para realizar análisis de sensibilidad ante parámetros críticos de la tesis como son el número de swirl y el dosado o la consideración de un difusor.

Se analizarán las tendencias más importantes a través del cálculo de los perfiles axiales y radiales de temperatura y velocidad además de sus correspondientes contornos.

6.5.1 Influencia del número de swirl

Se analizan los casos de bajo número de swirl (0.2) medio (0.6) y alto (1.1). Los tres casos emplean aletas curvas. Para los análisis de sensibilidad del número de swirl se usan los casos C8, C9 y C10 (Tabla 6-7). Se ha notado en el apartado 6.4.1 la disminución del número de swirl con la consideración de casos reactivos.

La Figura 6-29 y la Figura 6-31 muestran los contornos de temperatura para número de swirl de 0.2, 0.6 y 1.1 en la zona cercana a la expansión brusca y en la cámara de combustión respectivamente.

En caso de tener bajo número de swirl, la falta de IRZ produce una zona delgada asociada a débiles gradientes de temperatura. Los resultados numéricos predicen que el combustible no llega al interior de la IRZ, aunque otras referencias afirman que puede ser posible. Contrastando dichas llamas, es posible concluir la disminución del espesor del frente de llama si aumenta el número de swirl. Números de swirl bajos reducen las zonas de altas temperatura y disminuyen el confinamiento.

La tendencia actual pasa por emplear quemadores con bajo número de swirl, ya que al disminuir la temperatura se producen menos NO_x . La problemática reside en una estabilización adecuada de la llama, que puede sufrir más oscilaciones al estar menos confinada.

Número de swirl altos proporcionan una temperatura mucho más alta en la pared, lo que se puede traducir en un intercambio térmico notablemente distinto debido a la radiación y posibles daños a los materiales de la pared. Las temperaturas se homogenizan más en los casos con swirl alto debido a la compacidad de la llama.

En la Figura 6-30 (Durox et al., 2013) se muestran imágenes de llamas experimentales para números de swirl bajos, medios y altos (0.25, 0.5 y 0.95 respectivamente). Esta instalación dispone de un generador de swirl radial que puede modificar el ángulo de las aletas. Puesto que en Durox et al. (2013) se calcula el número de swirl en función de varias correlaciones para cada ángulo de salida, se considera número de swirl medio entre todas ellas.

Es importante resaltar que la configuración de las llamas experimentales de Durox et al. (2013) es premezclada, mientras que la configuración empleada en este trabajo es no premezclada. Se pretende mostrar únicamente la influencia del número de swirl en llamas premezcladas y no premezcladas.

En ambas configuraciones la llama se encuentra más confinada y compacta a medida que aumenta el número de swirl.

La Figura 6-32 muestra los contornos de velocidad para bajo número de swirl (0.2) (izq.), medio (0.6) (centro) y alto (1.1) (dcha.). A medida que aumenta el número de swirl, la IRZ y la ORZ se sitúan aguas arriba. El tamaño de las zonas de recirculación se ve reducido con el aumento del número de swirl, ya que la llama se vuelve más compacta. La Figura 6-31 y la Figura 6-32 muestran cómo el ángulo del chorro se va modificando con el incremento del número de swirl.

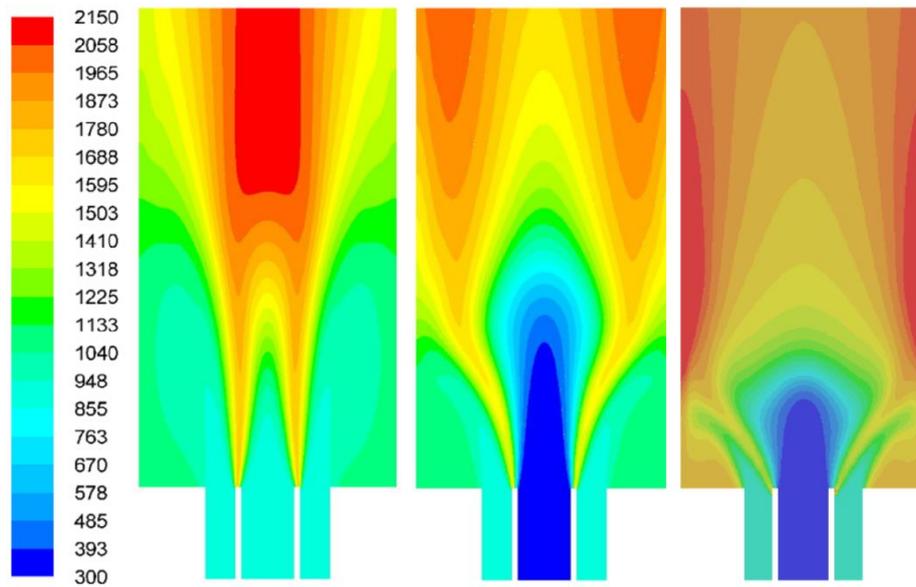


Figura 6-29 Contornos de temperatura para número de swirl de 0.2 (izq.), 0.6 (centro) y 1.1 (dcha.) Zona cercana a la expansión brusca. Configuración no premezclada.

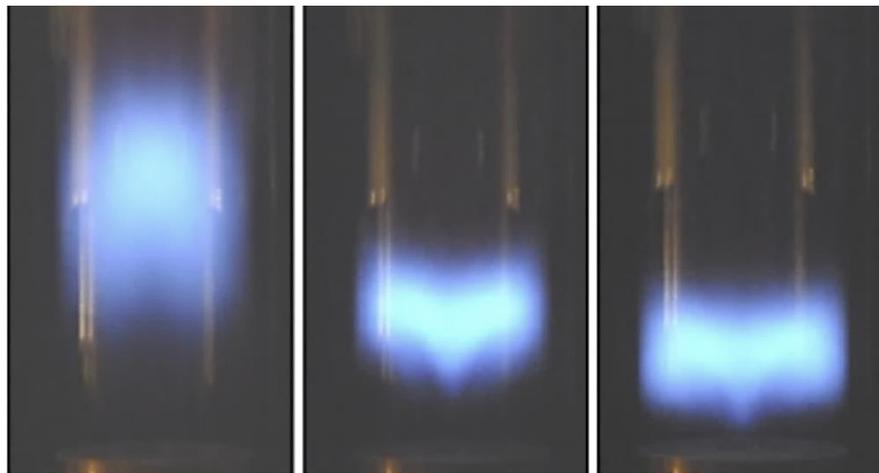


Figura 6-30 Imágenes de llamas con números de swirl bajos (izq.) ($S_{\text{medio}} = 0.25$), medios (centro) ($S_{\text{medio}} = 0.5$) y altos (dcha.) $S_{\text{medio}} = 0.95$. Resultados experimentales de Durox et al., 2013. Configuración premezclada.

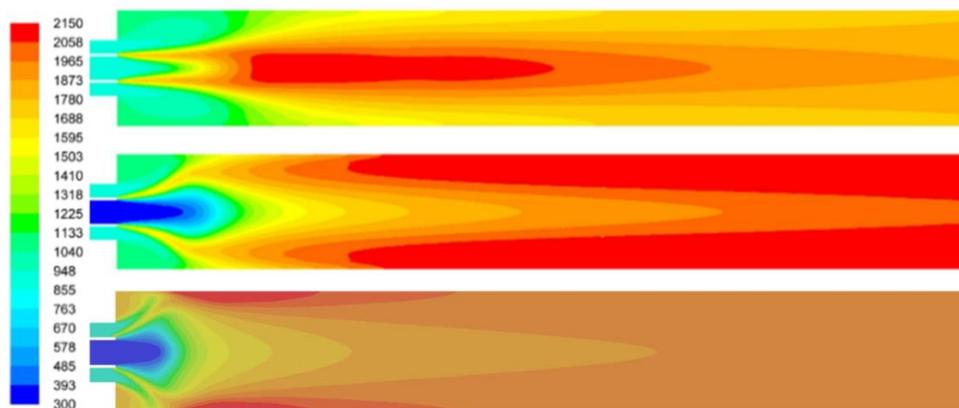


Figura 6-31 Contornos de temperatura para número de swirl de 0.2 (sup.), 0.6 (centro) y 1.1 (inf.) Longitud completa de la cámara.

Inyectores de bajo swirl no promueven la capa de cortadura, lo que resulta en grandes zonas de mezclado y reacción, con gradientes débiles de temperatura y especies. En contrapunto, los quemadores de alto swirl promueven la formación de una zona de recirculación interior con productos calientes de reacción.

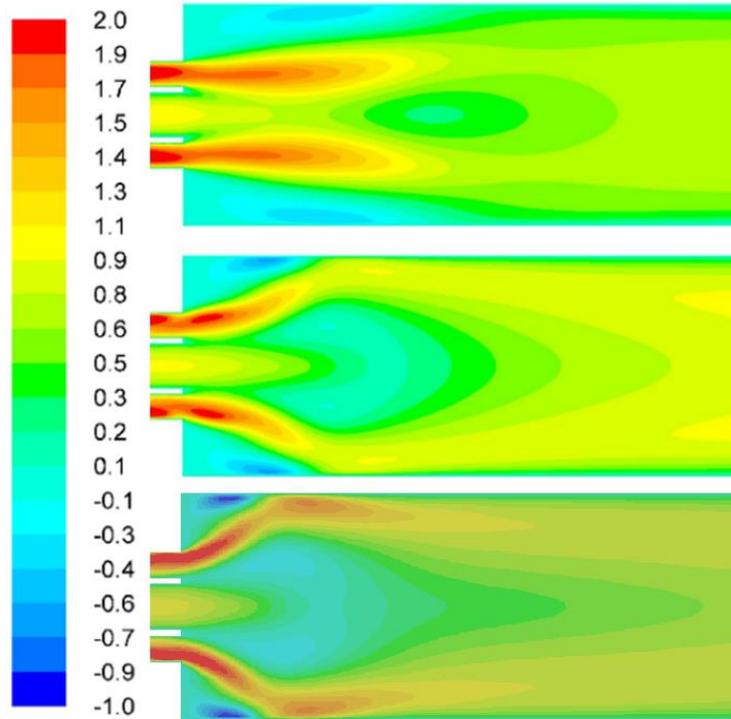


Figura 6-32 Contornos de velocidad para bajo número de swirl (0.2) (izq.), medio (0.6) (centro) y alto (1.1) (dcha.)

La Figura 6-33 y la Figura 6-34 muestran los perfiles de temperatura y de velocidad axial en función de la posición axial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1. El aumento el número de swirl incrementa el tamaño de la IRZ y disminuye el de la ORZ. Se aprecia cómo números de swirl bajos proporcionan una mayor temperatura axial, debido al bajo confinamiento de la llama.

Los perfiles de velocidad no cortan al eje de abscisas, por lo que la recirculación no tiene forma de bulbo para ningún número de swirl analizado. Se aprecia también cómo la IRZ se mueve aguas arriba con el aumento del número de swirl. Cuanto mayor es el número de swirl, mayores son los gradientes de velocidad axial.

La Figura 6-35 muestra los perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1 para posiciones axiales adimensionales de 0.04D, 0.41D y 0.82D. En 0.04D los perfiles de velocidad son similares, pero el gradiente de velocidad para $S=1.1$ es significativamente mayor que para $S=0.6$ y $S=0.2$. En 0.41D se aprecia que los perfiles de velocidad son muy diferentes, siendo mayores para menores números de swirl debido al bajo confinamiento de la llama. Para mayores posiciones axiales los perfiles de velocidad son similares en números de swirl medios y altos.

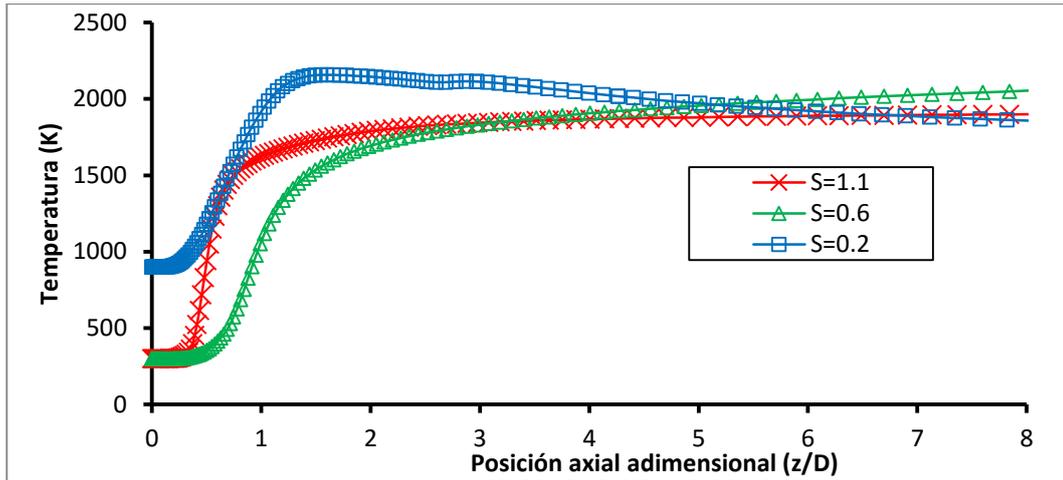


Figura 6-33 Perfiles de temperatura axial en función de la posición axial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1

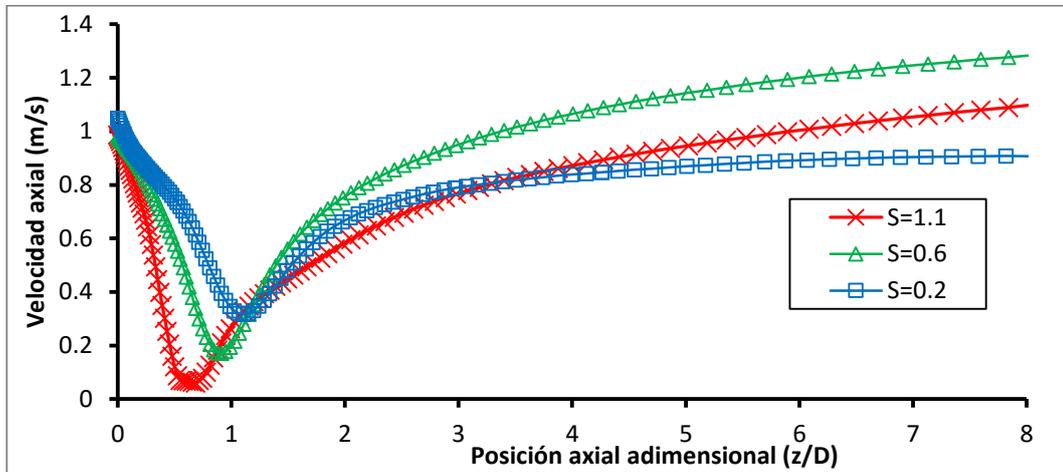


Figura 6-34 Perfiles de velocidad axial en función de la posición axial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1

La Figura 6-36 muestra los perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1 en las posiciones axiales adimensionales 0.04D, 0.41D y 0.82D.

Para bajo número de swirl, las temperaturas en la parte exterior del quemador son significativamente inferiores, mientras que a medida que aumenta el número de swirl, la expansión radial del chorro y la temperatura aumentan. La temperatura en la parte interior del quemador para bajo número de swirl es muy alta incluso en secciones en las que la combustión no ha tenido lugar, lo que indica un alto mezclado de los chorros de la tobera interior y exterior (la temperatura del fluido que circula por la tobera exterior es 900K).

En posiciones radiales altas y $S=1.1$ se observan altas temperaturas. Esto se debe al contacto de la llama con la pared exterior del quemador, ya que el ángulo de apertura del chorro es alto para $S=1.1$.

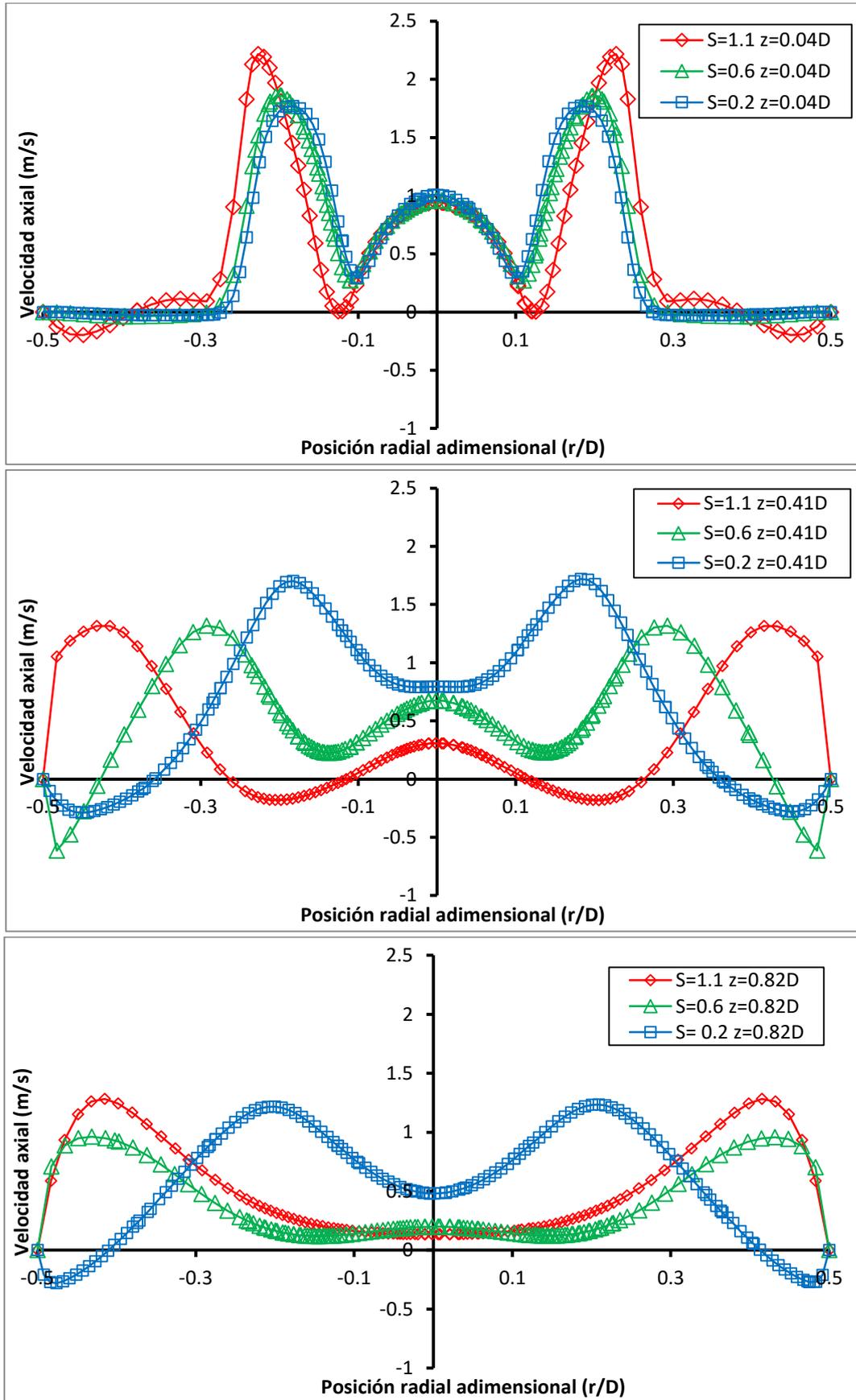


Figura 6-35 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1 para posiciones axiales 0.04D, 0.41D y 0.82D

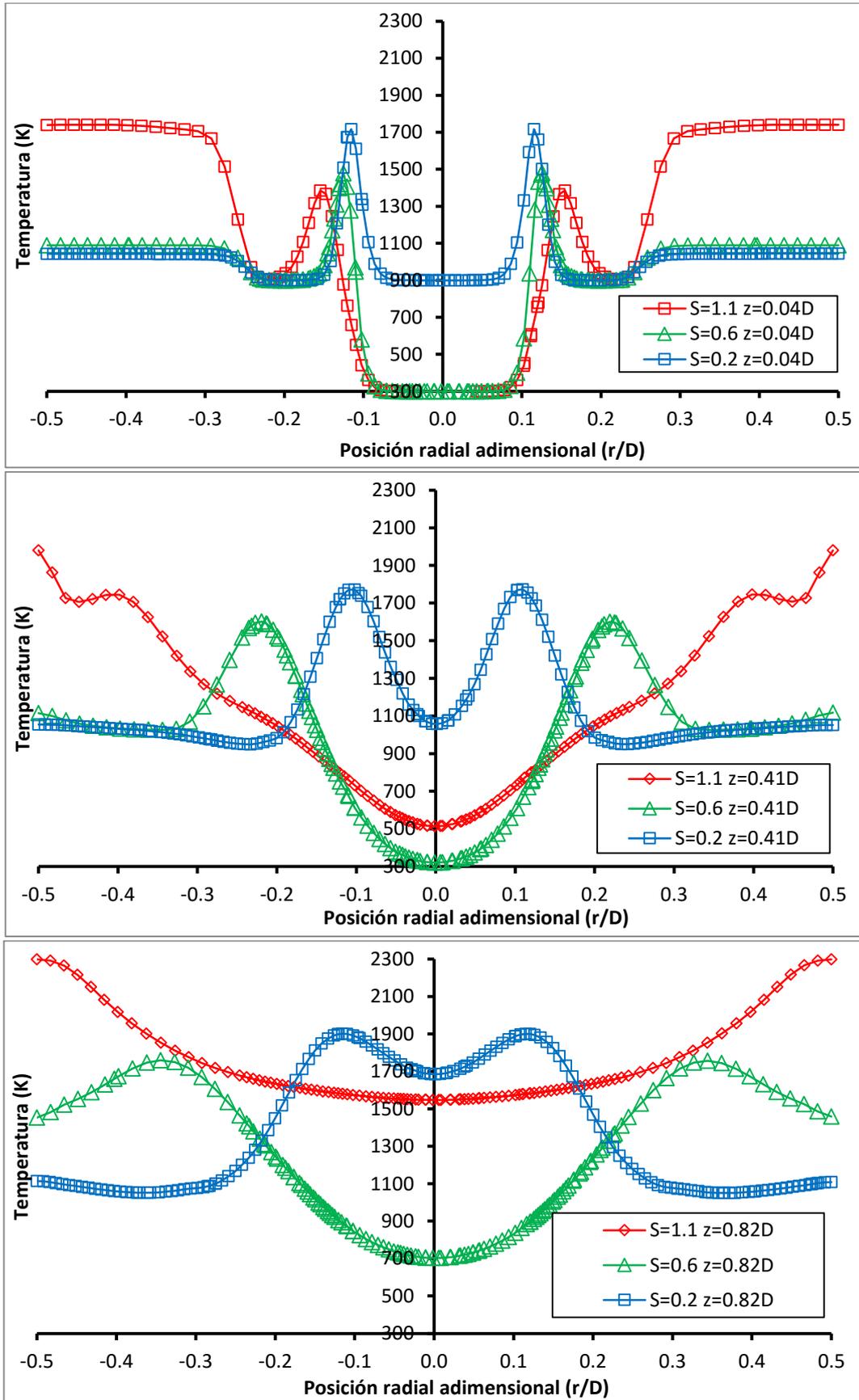


Figura 6-36 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para casos con número de swirl 0.2, 0.6 y 1.1 para posiciones axiales 0.04D, 0.41D y 0.82D

6.5.2 Influencia del dosado

Se analiza la influencia del dosado resolviendo casos para mezclas estequiométrica ($\Phi_r = 1$), pobre ($\Phi_r = 0.75$) y rica ($\Phi_r = 1.25$). No se considera el uso de un difusor. Los tres casos analizados emplean aproximadamente el mismo número de swirl (1.1). Los análisis de sensibilidad del dosado se realizan estudiando los casos C7, C10 y C14 (Tabla 6-7).

Es importante notar que los casos analizados tienen similares perfiles aerodinámicos, ya que se únicamente modifica la fracción másica de combustible. Esto significa que el caudal que entra por la tobera interior es el mismo para los tres casos, ya que el fluido inerte tiene las mismas propiedades que el combustible. De esta forma, se puede regular el dosado sin modificar la aerodinámica de la mezcla. Esto permite desacoplar el efecto aerodinámico del termoquímico, ya que como se ha comentado a lo largo de la tesis, la combustión en este tipo de configuración viene determinada por el mezclado y la turbulencia.

La Figura 6-37 y la Figura 6-38 muestran los contornos de temperatura y velocidad para llamas pobres, estequiométricas y ricas (dosados 0.75, 1 y 1.2 respectivamente). A medida que aumenta el dosado, la temperatura se incrementa. Las velocidades axiales son similares en los tres casos.

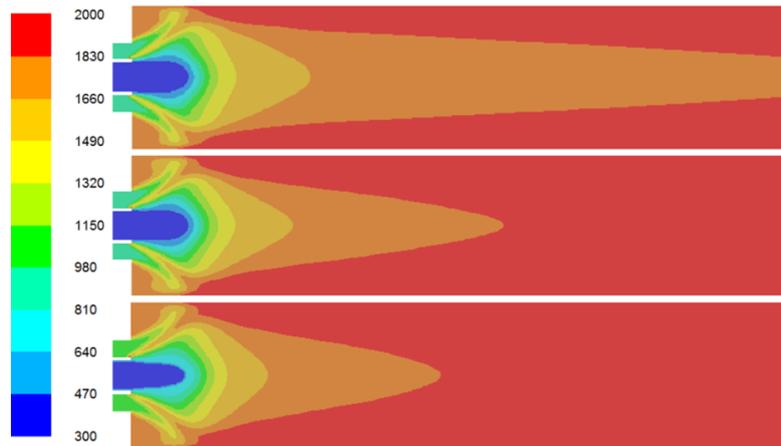


Figura 6-37 Contornos de temperatura para $\Phi_r = 0.75$ (izq.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (dcha.)

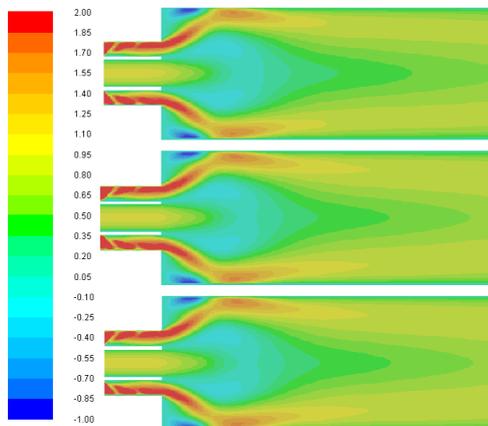


Figura 6-38 Contornos de velocidad para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

Se observa una diferencia importante entre los casos de dosado pobre y estequiométrico mientras, que la relativa a los casos de dosado estequiométrico y rico es menor.

Se puede usar la temperatura de salida como índice del combustible quemado o como índice de la energía obtenida de la combustión. La temperatura de salida de los gases de combustión para dosado pobre es 1851K, mientras que para dosado estequiométrico y dosado rico es 1913K y 1915K respectivamente.

El incremento de la temperatura del caso con dosado pobre respecto al caso con dosado estequiométrico es justificable de forma sencilla, ya que el combustible disponible para quemar es mayor y existe O_2 en exceso respecto al caso de dosado pobre.

Cabría esperar una disminución de la temperatura en el caso de dosado rico respecto al de dosado estequiométrico, ya que el caudal de combustible es mayor y la energía de la combustión la misma. No se produce la disminución de la temperatura esperada, sino que de hecho obtiene un ligero aumento. Es importante recordar que el dosado se regula modificando la fracción másica de la mezcla que entra por la tobera interior y que el fluido inerte tiene las mismas propiedades que el metano. Esto permite regular el combustible disponible para quemar, manteniendo el mismo caudal por la tobera interior.

Con el objeto de justificar dicha tendencia, se han realizado dos análisis de sensibilidad del dosado con el modelo ED, ya que es el modelo de combustión más sencillo. Se han seguido metodologías distintas para cada análisis.

El primer análisis ha sido realizado regulando el dosado a través de la modificación de la fracción másica de combustible a la entrada, manteniendo la velocidad de entrada de la tobera interior fija. La temperatura de salida se muestra en la Figura 6-39. Se aprecia que ésta no se ve incrementada para dosados relativos superiores al estequiométrico de forma análoga a los resultados presentados anteriormente.

El segundo análisis ha sido realizado regulando el dosado a través de la modificación de la velocidad de entrada de la tobera interior y manteniendo fija e igual a la unidad la fracción másica de combustible a la entrada. La temperatura de salida se muestra en la Figura 6-40. Se aprecia que la temperatura de salida se ve incrementada para dosados relativos superiores al estequiométrico. Esta metodología presenta la desventaja de modificar significativamente el patrón de flujo respecto a los modelos isoterms.

Adicionalmente se comprueba que las temperaturas de salida en el segundo análisis de sensibilidad son superiores a las del primero. Esto se debe a la diferencia de flujo másico que circula por la tobera interior. En el segundo análisis la velocidad de entrada es significativamente menor, ya que se introduce metano puro y no existe componente inerte. De esta forma el gasto másico total es menor que en el primer

análisis, por lo que como la energía es la misma, las temperaturas de salida son superiores.

Basándose en lo anterior se puede concluir que empleando la metodología del primer análisis de sensibilidad, cualquier incremento del dosado solo puede producir temperaturas iguales o superiores. En esta metodología se modifica la fracción másica de combustible a la entrada mientras se mantiene la velocidad de entrada de la tobera interior fija.

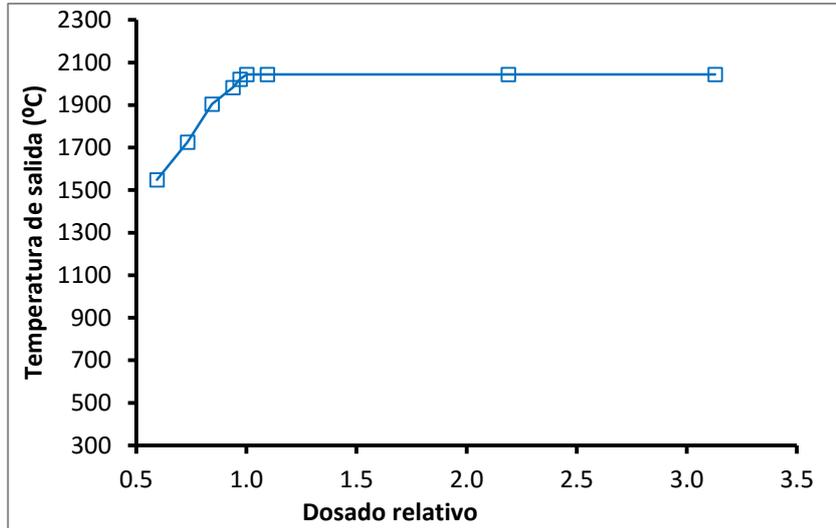


Figura 6-39 Temperatura de salida en función del dosado relativo. Modelo ED. Análisis de sensibilidad del dosado modificando la fracción másica de combustible a la entrada

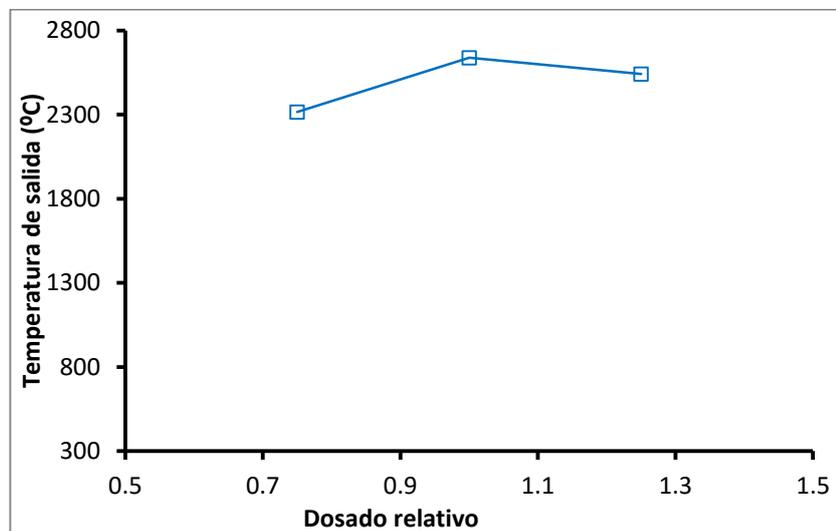


Figura 6-40 Temperatura de salida en función del dosado relativo. Modelo ED. Análisis de sensibilidad del dosado modificando la velocidad de entrada del combustible.

Se ha comprobado anteriormente que la combustión con dosado estequiométrico no es completa. Al considerar dosados rico, la temperatura aumenta ligeramente, ya que parte del combustible que con dosado estequiométrico no se quemaba, con dosado rico se quema.

La Figura 6-41, Figura 6-42 y Figura 6-43 muestran los contornos de CH_4 , CO y O_2 respectivamente para dosado bajo ($\Phi_r = 0.75$), medio ($\Phi_r = 1$) y alto ($\Phi_r = 1.25$).

Se aprecia que a medida que aumenta el dosado, aumenta la cantidad de combustible que no se quema. En los casos con dosado pobre y estequiométrico la combustión no es completa existiendo metano sin quemar a la salida. En caso de considerar dosado rico se consume ligeramente más combustible que con dosado estequiométrico, ya que existe defecto de aire.

Se aprecia un aumento de la generación de CO con el incremento del dosado. La existencia de CO en dosados pobres es un indicador de una combustión incompleta.

Se observa el exceso de O_2 en el caso con dosado pobre, mientras que en los casos con dosado estequiométrico y rico la fracción másica de O_2 en posiciones axiales grandes es mínima. Adicionalmente se observa que la ORZ se compone de O_2 .

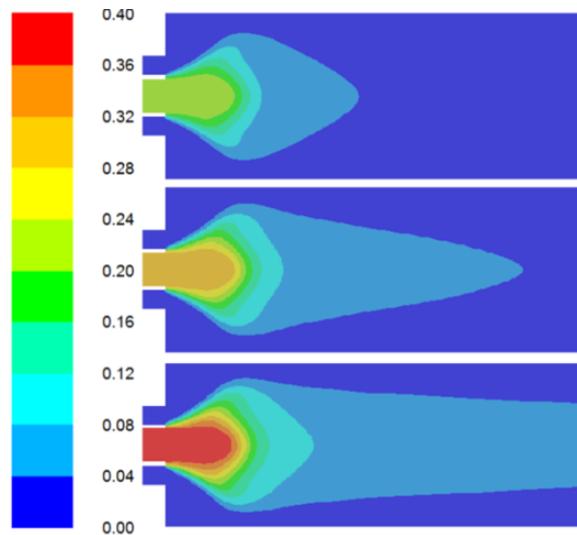


Figura 6-41 Contornos de fracción másica de metano para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

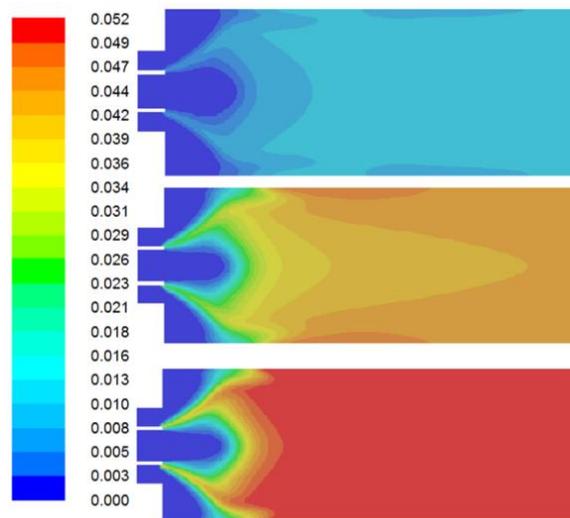


Figura 6-42 Contornos de fracción másica de CO para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

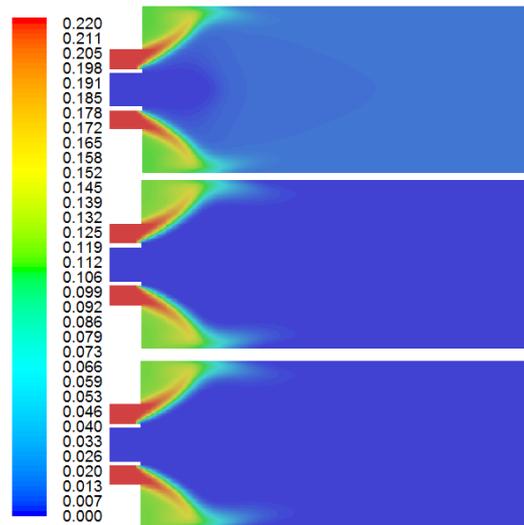


Figura 6-43 Contornos de fracción másica de O_2 para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

La formación NO_x está directamente ligada con la temperatura, por lo que la hipótesis de cámara adiabática y la no consideración de la radiación pueden incrementar notablemente la emisión de NO_x como se explicó en el apartado 6.4 en la descripción del flujo reactivo.

No se incluyen resultados de NO_x ya que no se han obtenido tendencias concluyentes. Se obtienen valores altos que enmascaran la influencia del dosado, debido las hipótesis presentadas anteriormente.

Habitualmente suelen darse valores bajos de NO_x , por lo que puede haber problemas con el modelo PDF debido a la convergencia.

Se recomienda el uso de una correlación adicional para los NO_x , ya que se puede considerar las tres fuentes de NO_x existentes (térmica, relativa al combustible y puntual o formación súbita) con flujo congelado y de forma sencilla. Otra opción es considerar el modelo EDC con mecanismos de reacción de formación de NO_x , aunque puede presentar un alto coste computacional. No se han analizado dichas sugerencias debido a que exceden los objetivos y el contenido de este trabajo.

La tendencia actual en quemadores es usar mezclas pobres, ya que éstas tienen una menor temperatura de equilibrio y por lo tanto, la emisión térmica de óxidos de nitrógeno es menor. Sin embargo, se necesitan fuertes números de swirl con el fin de quemar de manera estable.

La Figura 6-44 y la Figura 6-45 muestran los perfiles de temperatura en función de la posición axial, para dosado bajo ($\Phi_r = 0.75$), medio ($\Phi_r = 1$) y alto ($\Phi_r = 1.25$). Los perfiles de dosado estequiométrico y rico son similares mientras que para dosado pobre la temperatura desciende 60K aproximadamente. La velocidad axial es menor para dosado pobre que para dosado estequiométrico y rico. Este hecho es análogo a lo explicado en el apartado 6.4 respecto al flujo reactivo. Se indicó que se obtiene una mayor expansión axial con incrementos de temperatura.

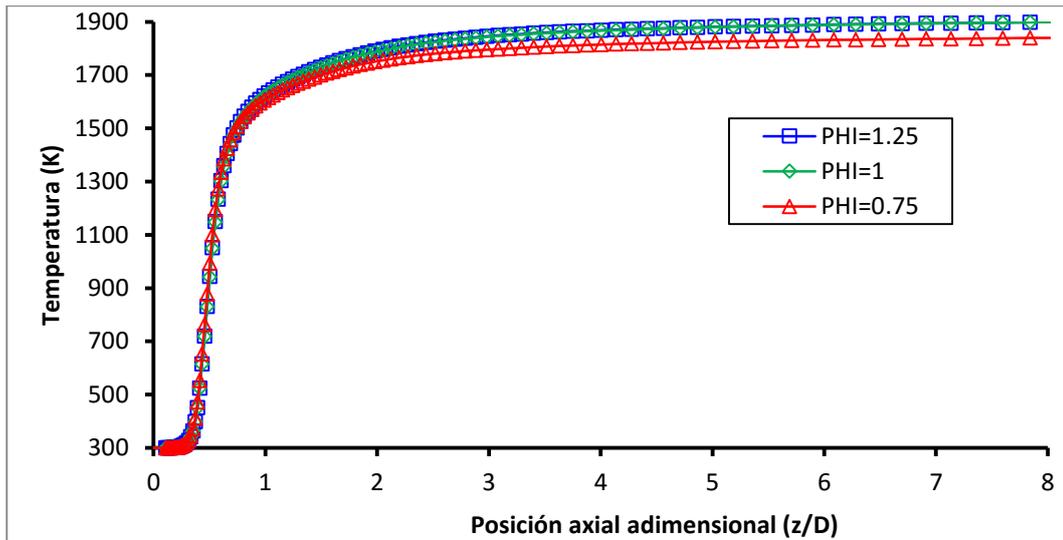


Figura 6-44 Perfiles de temperatura en función de la posición axial para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

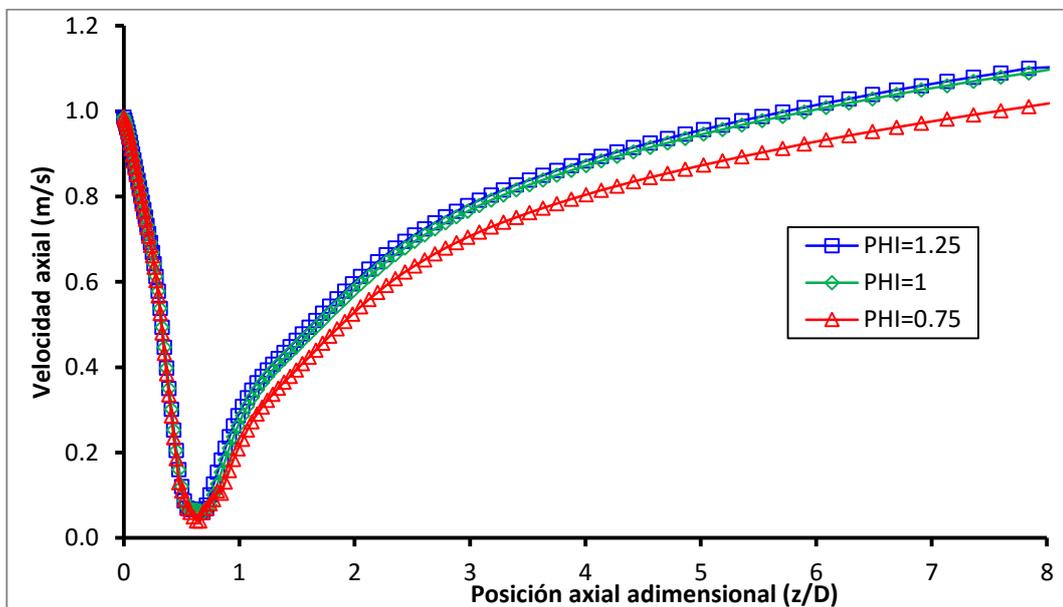


Figura 6-45 Perfiles de velocidad axial en función de la posición axial adimensional para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

La Figura 6-46 y Figura 6-47 muestran los perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para dosado bajo ($\Phi_r = 0.75$), medio ($\Phi_r = 1$) y alto ($\Phi_r = 1.25$). Los perfiles de velocidad axial son idénticos. La Figura 6-44 y la Figura 6-45 muestran que los perfiles axiales de velocidad y temperatura son coincidentes hasta posiciones axiales de D . En posiciones radiales altas y para una sección axial de $0.82D$ se obtienen temperaturas muy altas cerca de la pared. Se encuentran diferencias de hasta 100K en caso de emplear dosado pobre.

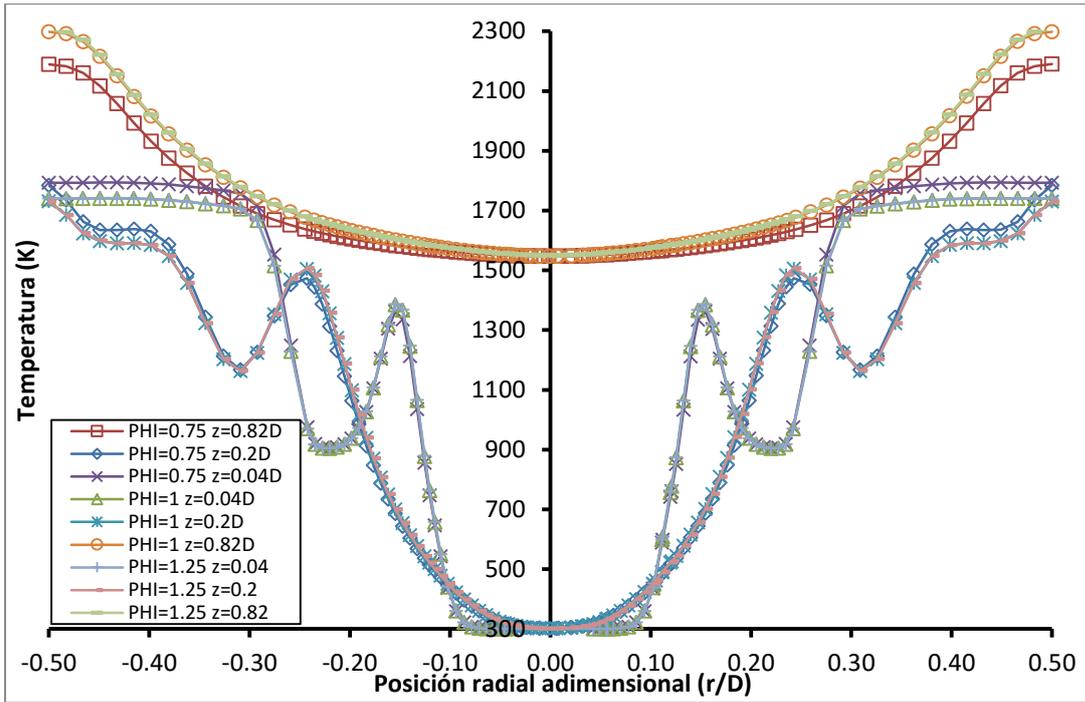


Figura 6-46 Perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

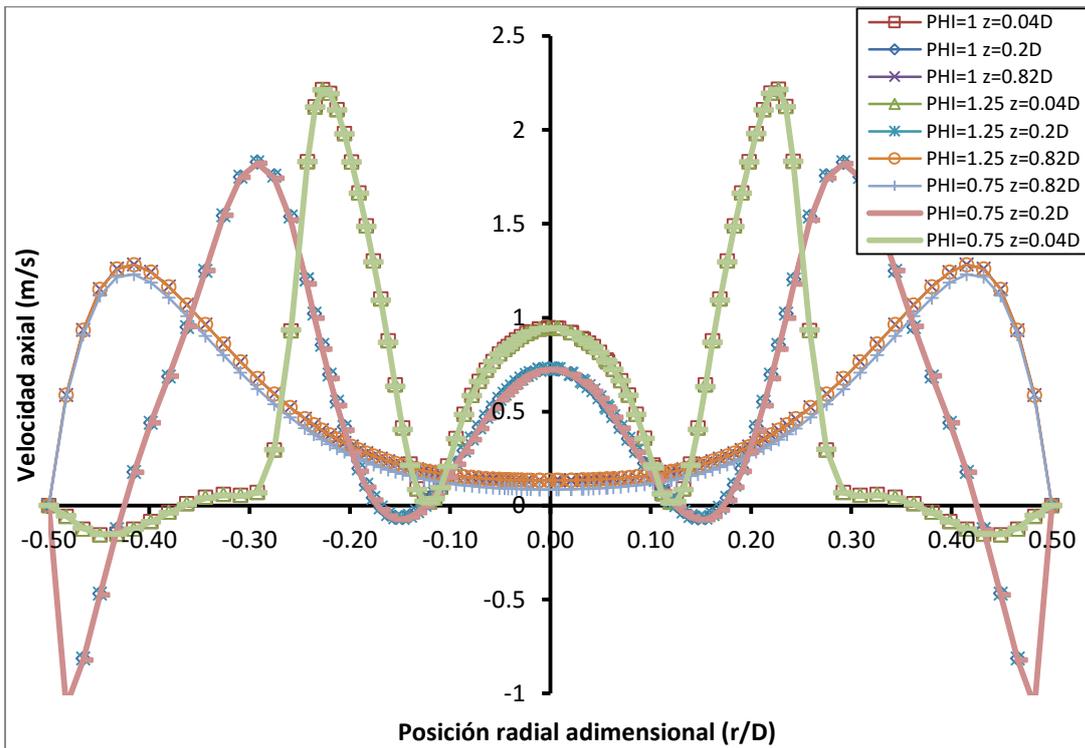


Figura 6-47 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para $\Phi_r = 0.75$ (sup.) $\Phi_r = 1$ (centro) y $\Phi_r = 1.25$ (inf.)

6.5.3 Influencia del difusor

Esta sección está dedicada al estudio de la influencia del difusor. Tres casos con difusores de semiángulo (α) 30°, 60° y 90° (sin difusor) fueron simulados. Para el análisis de influencia del difusor se emplean los casos C11, C12 y C13 (Tabla 6-7). Los modelos con difusor se mallaron con celdas tetraédricas, debido a una mayor complejidad geométrica. El modelo sin difusor también fue mallado con celdas tetraédricas para eliminar la influencia del tipo de mallado. Como se indica en el apartado 6.2.5, las mallas tetraédricas predicen una llama situada ligeramente aguas arriba de la capa de cortadura. Se busca únicamente obtener las principales tendencias.

La Figura 6-48 y Figura 6-49 muestran los contornos de velocidad axial y temperatura para $S=1.1$, con difusores de 30°, 60° y 90° (sin difusor). El efecto principal del difusor es impedir la ORZ cerca de las paredes.

Los resultados muestran la existencia de un ángulo límite a partir del cual el efecto proporcionado por el difusor desaparece. Este efecto también apareció en el análisis isoterma LES (ver apartado 5.13). Difusores de 60° presentan menores velocidades en la parte exterior del quemador. La IRZ aumenta considerablemente para difusores de 60°, mientras que para difusores de 30°, la IRZ no se ve modificada apenas. El difusor de 60° tiene un menor gradiente térmico axial que un difusor de 30° o 90° (sin difusor).

El uso de difusores puede ocasionar problemas de alta temperatura en las paredes, debido a la reclusión de la llama. Esto podría producir fatiga térmica del quemador.

En trabajos futuros se reducirá el grado de confinamiento del quemador para solucionar dichos problemas.

La Figura 6-50 y la Figura 6-51 muestran los perfiles de temperatura en función de la posición axial adimensional, para $S=1.1$ y casos con difusor de 30°, 60° y 90° (sin difusor). Difusores de 60° tienen un perfil axial de temperatura más suave, lo que podría traducirse en menores NO_x . Además tienen mayores velocidades axiales.

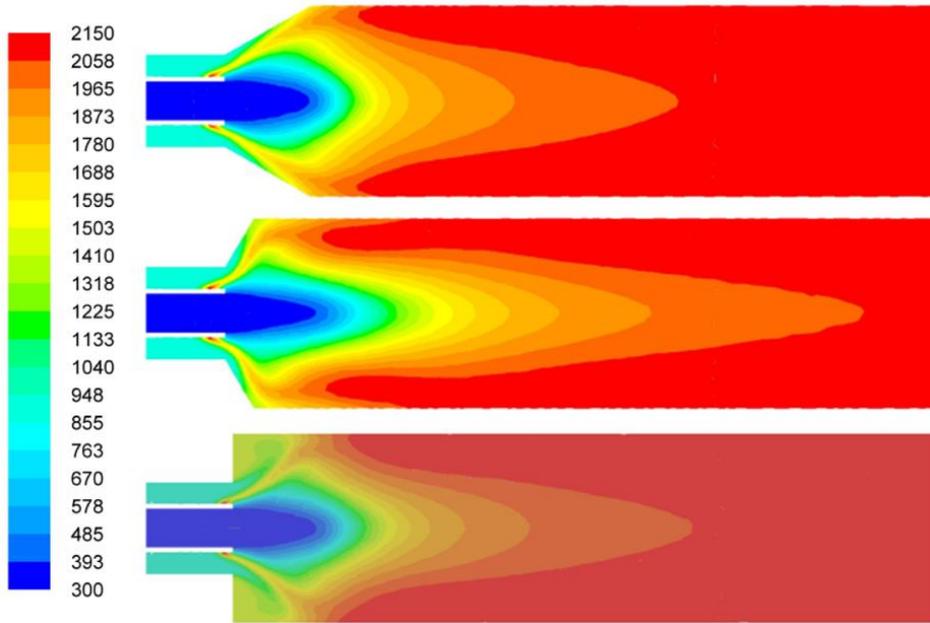


Figura 6-48 Contornos de temperatura (K) para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)

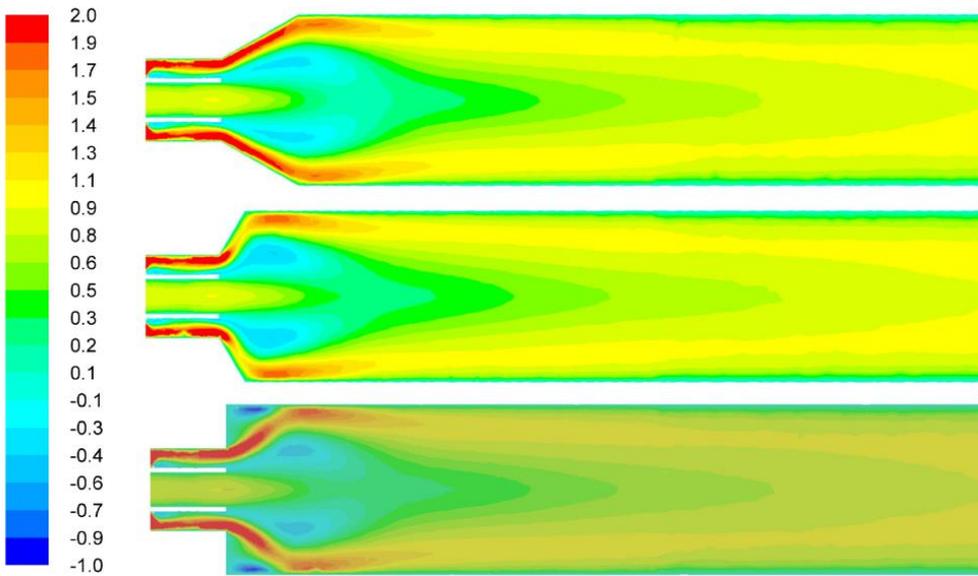


Figura 6-49 Contornos de velocidad (m/s) para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)

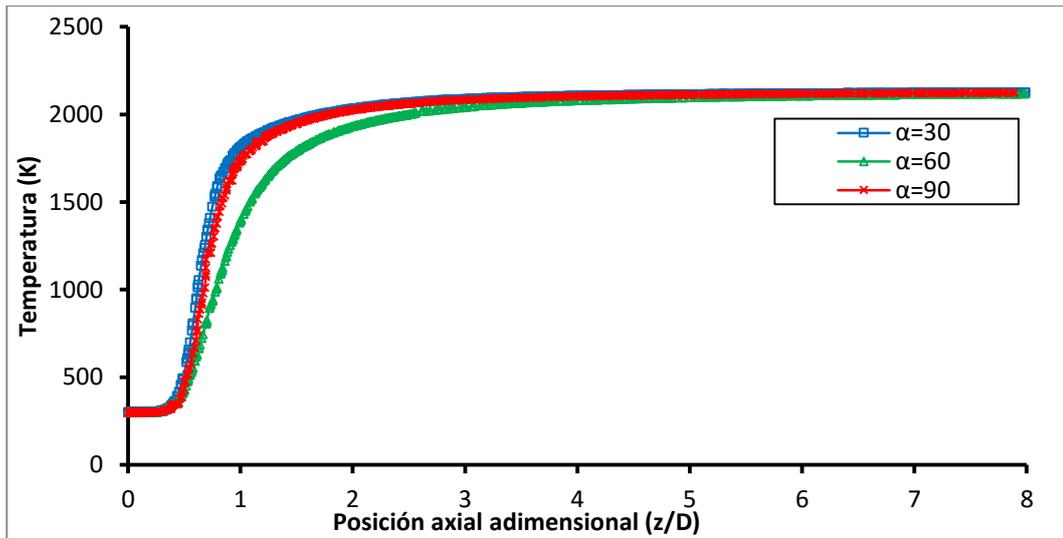


Figura 6-50 Perfiles de temperatura en función de la posición axial adimensional para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)

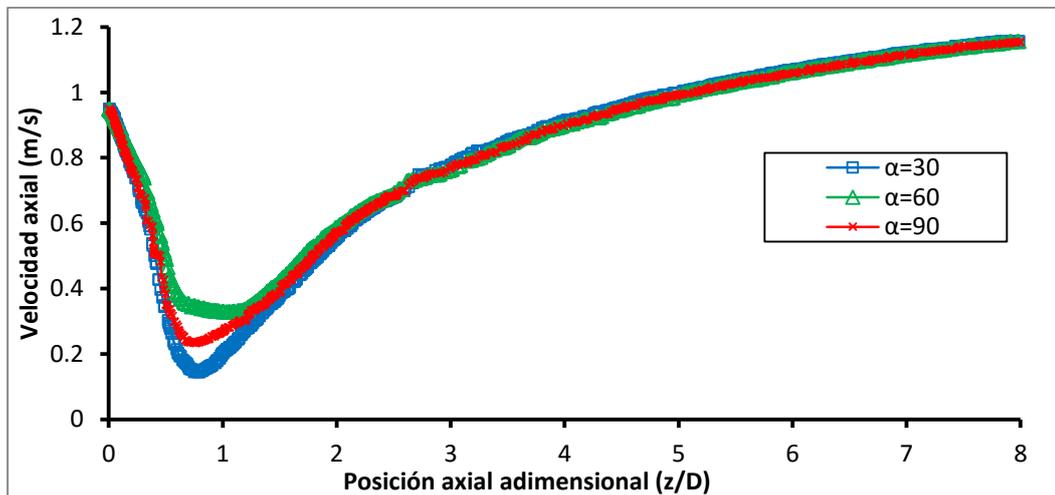


Figura 6-51 Perfiles de temperatura en función de la posición axial adimensional para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) (inf.)

La Figura 6-52 muestra los perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para $S=1.1$ y casos con difusor de 30° , 60° y 90° (sin difusor), para las posiciones axiales $0.04D$, $0.2D$ y $0.82D$ respectivamente.

La Figura 6-53 muestra los perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para $S=1.1$ y casos con difusor de 30° , 60° y 90° (sin difusor), para las posiciones axiales $0.04D$, $0.2D$ y $0.82D$ respectivamente.

A pesar de la diferente configuración geométrica los perfiles de temperatura y velocidad axial para $z=0.04D$ son similares con la salvedad de que los difusores impiden la ORZ. Los picos de velocidad axial a la entrada de la cámara de combustión se reducen ligeramente para difusores de 60° . Para $z=0.2D$ el uso de difusores de 60° produce mayores temperaturas y menores velocidades axiales. Para $z=0.82D$ las temperaturas en la parte central son menores para difusores de 60° , pero las velocidades axiales son similares en los tres casos analizados.

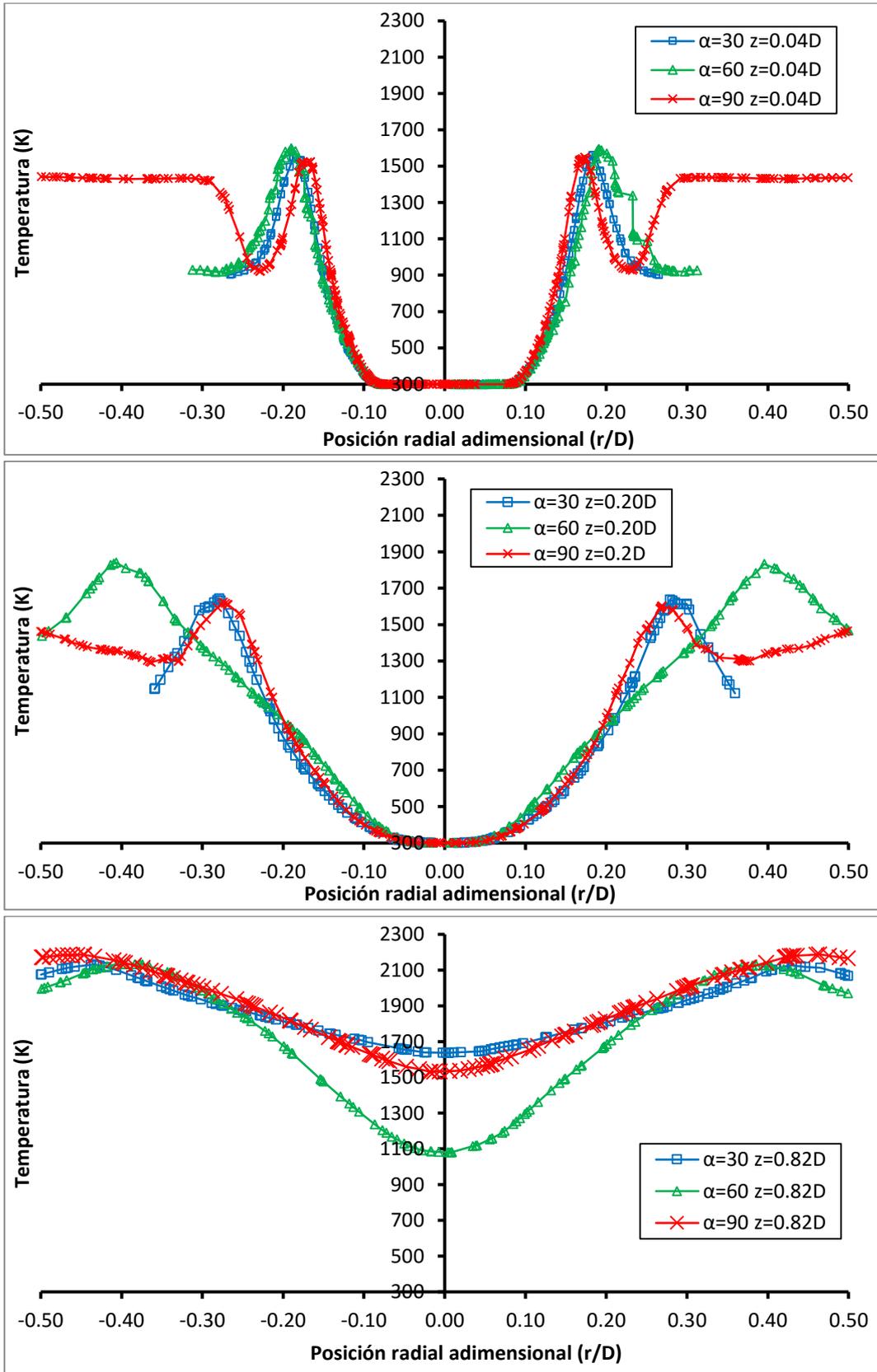


Figura 6-52 Perfiles de temperatura en función de la posición radial adimensional para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°)(inf.) para posiciones axiales $0.04D$, $0.2D$ y $0.82D$

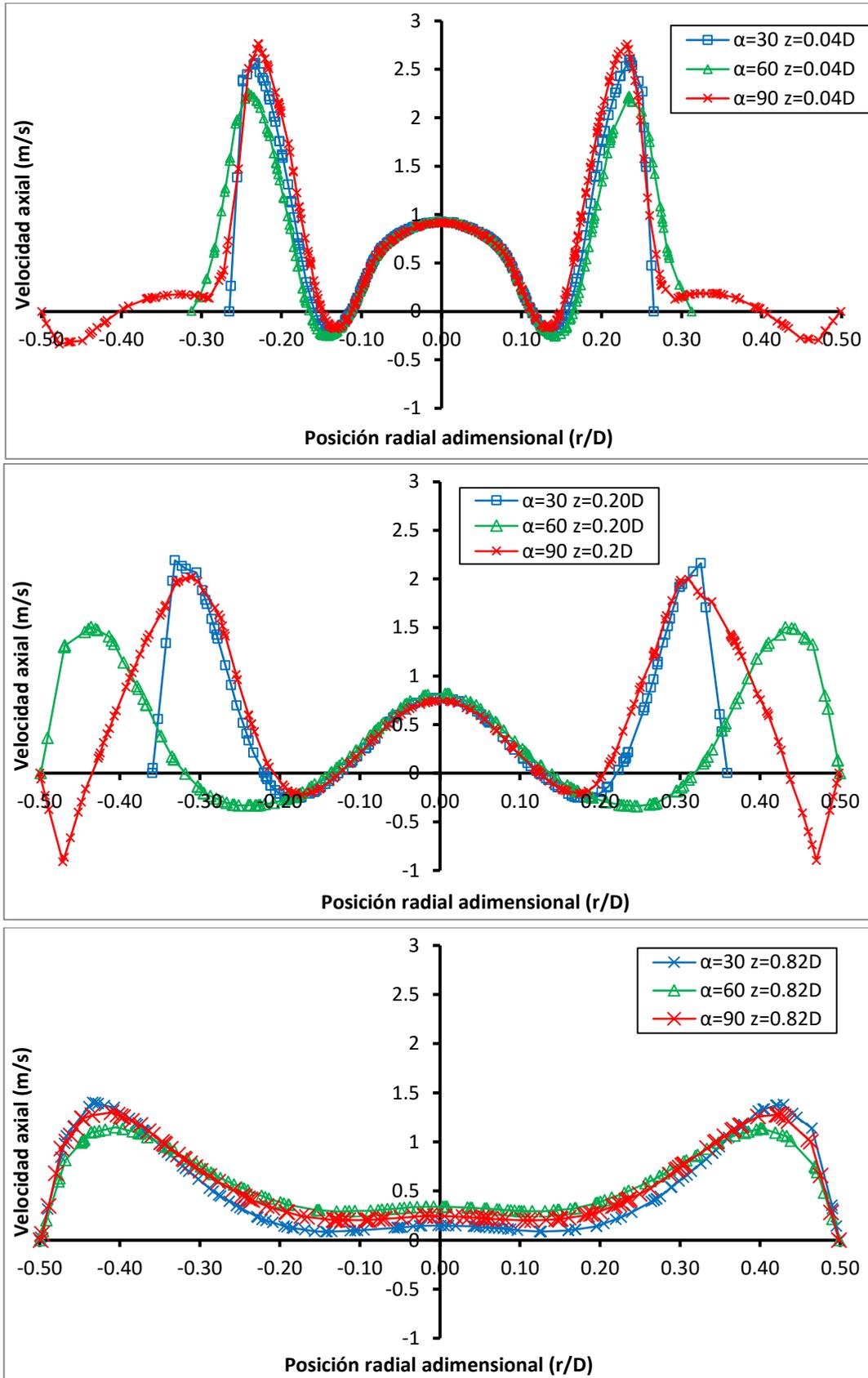


Figura 6-53 Perfiles de velocidad axial en función de la posición radial adimensional para $S=1.1$ casos con difusor de 30° (sup.), 60° (centro) y sin difusor (90°) para posiciones axiales $0.04D$, $0.2D$ y $0.82D$

6.6 Conclusiones

Es importante resaltar el carácter innovador de la simulación de la combustión no premezclada en flujos turbulentos, ya que a pesar de ser una de las configuraciones más empleadas por su seguridad, no existe una metodología aceptada ni para la simulación ni para la validación.

Una vez se ha confeccionado un modelo de simulación adecuado para la aerodinámica y la turbulencia, se desarrolla un modelo de combustión robusto.

Se ha establecido una metodología de simulación de la combustión mediante técnicas RANS. Se ha definido el modelo numérico empleado para el análisis reactivo centrándose en los modelos geométricos, las condiciones de operación, de contorno y las principales características numéricas.

Los modelos de combustión analizados son el modelo Eddy Dissipation, Eddy Dissipation Concept y PDF. El modelo EDC ha sido combinado con tres mecanismos de reacción simplificados (Westbrook, 1981, Franzelli 2012 y Jones y Linstedt 1987) de una, dos y cuatro reacciones respectivamente, obteniéndose resultados similares entre ellos, por lo que se concluye que no existe un aumento de precisión en caso de considerar dos o cuatro reacciones. El modelo PDF empleado considera veinte especies químicas y tablas de llamas predefinidas.

Para comprobar si los resultados obtenidos con los distintos modelos son aceptables, es necesario compararlos frente a resultados experimentales. Para ello se comparan las temperaturas obtenidas en un modelo sin reacción, un modelo ED de seis componentes, un modelo EDC con una reacción y un modelo PDF con veinte componentes frente a la temperatura adiabática de llama calculada según química GRI-Mech.

Dicha comparativa es más fiable en la zona de la llama al considerar el quemador aislado térmicamente y no existir pérdidas de calor. Por este motivo los modelos se han simulado con paredes adiabáticas y sin transferencia de calor por radiación.

La dificultad de validación es alta, ya que en el contexto de llamas no premezcladas éstas se comportan localmente como ricas o como pobres. Algunas zonas locales de la llama pueden tener ganancias o pérdidas de calor, por lo que las temperaturas locales pueden no ajustarse correctamente en algunos puntos.

Se ha llegado a la conclusión que el modelo PDF es el que mejor ajusta, teniendo un consumo de recursos computacionales razonables, sin tener que llegar a resolver la cinética química, que se aporta de forma tabulada en el preproceso.

Los modelos se ordenan de mayor a menor temperatura de llama de la forma siguiente: PDF, EDC y ED. La temperatura tiene una relación inversamente proporcional al tamaño de la IRZ.

Posteriormente, empleando el modelo PDF, se ha descrito la estructura termoquímica de la llama y el patrón de flujo. Los perfiles son suaves, debido a que el estado termodinámico local de la llama proporcionada por el modelo de combustión

PDF es ponderado y está basado en la función de probabilidad beta. También el modelo de turbulencia es RANS lo que significa que el campo de flujo se promedia en el tiempo.

El patrón de flujo se ve significativamente modificado respecto a los análisis isoterms. La comparativa de un modelo con transferencia de calor y sin reacción química, pone de manifiesto que incluso el precalentado del aire que circula por la tobera exterior influye significativamente en el flujo, ya que al tener una densidad distinta, la cantidad de movimiento del chorro con rotación disminuye. En caso de comparar modelos con combustión, este efecto se ve acrecentado, ya que la combustión produce una expansión en los productos de reacción, incrementando la velocidad axial considerablemente. Esto hace que el número de swirl de modelos reactivos sea entre un 10 y un 27% menor que el de modelos no reactivos. Otro efecto importante que tiene la combustión en el flujo es modificar la geometría de la IRZ. Ésta cambia de forma, de bulbo a forma toroidal y su tamaño se ve reducido. Además la ORZ se mueve aguas abajo.

Debido a que la llama es una zona inestable y compleja de localizar, se han descrito y analizado los principales criterios de localización de la llama. Los criterios relacionados con la temperatura no proporcionan buenos resultados, debido a que las mayores temperaturas se producen en la parte final del quemador. Esto sucede porque no se han considerado pérdidas de calor ni radiación.

El criterio de la varianza de la fracción de mezcla indica el progreso de la reacción y predice la ubicación de la llama de forma razonable, coincidiendo en la posición axial de la llama con criterios relacionados con la presión, con el gradiente axial de fracción másica de combustible o con la disipación de energía cinética turbulenta.

Se comprueba como la llama se ubica en la capa de cortadura, es decir, en la zona de mayor turbulencia, coincidiendo con el concepto de química rápida indicado en el capítulo 2, que concluye que la combustión con números de Damköhler altos viene determinada por la turbulencia.

Las iso-superficies de la varianza de fracción de mezcla y temperatura constantes ponen de manifiesto los bordes de la llama y el progreso de la reacción, diferenciando dos zonas, una interior y otra exterior. Además se logra relacionar la IRZ con los productos de reacción, mientras que la ORZ se asocia a los reactivos.

Se obtiene que las emisiones de NO_x son altas, debido a no considerar pérdidas de calor ni radiación. Este efecto produce un aumento de la temperatura a lo largo del eje del quemador. Además se muestran problemas por alta temperatura cerca de las paredes.

Para poder establecer conclusiones acerca de las emisiones de NO_x , se recomienda emplear un tratamiento no adiabático e incluir la radiación en los modelos de simulación.

El uso de una correlación adicional para calcular los NO_x con el modelo PDF puede ser ventajoso, ya que se puede resolver con flujo congelado, converge

rápidamente y permite considerar las tres fuentes de NO_x de forma sencilla. Se plantea el uso de dichas correlaciones en trabajos futuros dentro de esta línea de investigación.

Se ha obtenido que la combustión con dosado estequiométrico no es completa ya existe CO y CH_4 en los productos de combustión.

Debido a que el modelo PDF tiene muy buena convergencia y rapidez al resolver únicamente dos ecuaciones de conservación adicionales, se convierte en un modelo robusto y apto para realizar análisis de sensibilidad ante parámetros críticos de la tesis, como el número de swirl y el dosado o la consideración de un difusor.

Se analizan los casos de bajo número de swirl (0.2) medio (0.6) y alto (1.1) concluyéndose que el incremento del número de swirl se asocia a la disminución del espesor de la llama.

En caso de tener bajo número de swirl, la falta de IRZ produce una zona delgada asociada a débiles gradientes de temperatura y de especies por lo que no se promueve la capa de cortadura, lo que se traduce en grandes zonas de mezclado y reacción. Números de swirl altos proporcionan una temperatura mucho más alta en la pared y mayores gradientes.

Las tendencias y la forma de la llama entre los resultados experimentales premezclados y resultados numéricos no premezclados son similares, ya que la llama se encuentra más confinada y compacta a medida que aumenta el número de swirl. También ocurre que el aumento del número de swirl sitúa la IRZ y la ORZ aguas arriba y aumenta el tamaño de la primera, pero disminuye el de la segunda.

El número de swirl no influye en la forma de la llama, teniendo en todos los casos analizados forma toroidal.

Se analiza la influencia del dosado resolviendo casos para mezclas estequiométrica ($\Phi_r = 1$), mezcla pobre ($\Phi_r = 0.8$) y mezcla rica ($\Phi_r = 1.25$). Se ha determinado una metodología numérica para modificar el dosado sin modificar la cantidad de movimiento de los chorros. De esta forma se puede variar el dosado sin modificar la aerodinámica de la mezcla para desacoplar el efecto aerodinámico del termoquímico.

Las tendencias ideales son quemar con mezclas pobres, debido a que tienen una menor temperatura de equilibrio y por lo tanto, la emisión térmica de óxidos de nitrógeno es menor. Sin embargo, se necesitan fuertes números de swirl con el fin de quemar de manera estable.

Se concluye que la influencia del dosado sobre las velocidades axiales es mínima. No se pueden establecer conclusiones claras acerca de la formación de NO_x y del dosado, ya que la temperatura es alta por la consideración de paredes adiabáticas.

La temperatura se incrementa considerablemente entre los casos de dosado pobre y estequiométrico, mientras que entre los casos estequiométrico y rico se observa un mínimo ascenso, justificado por la metodología de simulación.

Para analizar el efecto que tiene en el flujo reactivo un difusor, se simularon tres modelos con semiángulos de 30°, 60° y 90° (sin difusor) con celdas tetraédricas con el objeto de establecer las principales tendencias.

El uso de celdas tetraédricas puede producir pequeños errores numéricos. Se ha encontrado que estas celdas predicen la llama ligeramente aguas arriba de la capa de cortadura, lo cual es físicamente irrealista.

La principal conclusión es que los difusores impiden la ORZ. Se obtiene que el flujo es similar en el modelo sin difusor y con difusor de 30°, pero distinto al caso de 60°, lo que indica que existe un ángulo límite a partir del cual el efecto proporcionado por el difusor desaparece. La IRZ en difusores de 60° aumenta considerablemente, mientras que para el resto de casos no se modifica.

El uso de difusores puede ocasionar altas temperaturas en las paredes debido a la reclusión de la llama, pero presenta la ventaja de tener un perfil axial de temperatura más suave lo que podría traducirse en menores NO_x.

6.7 Referencias

- [161]. Durox, D., Moeck J.P., Bourgooin J.F., Morenton, P. Viallon M., Schuller T. and Candel S. (2013). Flame dynamics of a variable swirl number system and instability control. *Combustion and Flame* vol. 160, no. 9, pp. 1729–1742.
- [162]. Dwyer, H. (2002). CHEM_WORK6—A Personal PC Program for Ideal Gas Equilibrium Calculations with IC Engine Applications. Notes: For the use of the program CHEM_WORK6., UC Davis, 2002. [accessed Jul 29, 2016]. https://www.researchgate.net/publication/228575391_CHEM_WORK6-A_Personal_PC_Program_for_Ideal_Gas_Equilibrium_Calculations_with_IC_Engine_Applications_Notes_For_the_use_of_the_program_CHEM_WORK6
- [163]. Edelman, R.B. and Harsha, P.T. (1978). Laminar and turbulent gas dynamic in combustors current status. *Progress in Energy and Combustion Sciences*, vol. 4, pp. 1-62.
- [164]. Franzelli, B., Riber, E., Gicquel, L. Y. M. and Poinso, T. J. (2012). Large Eddy Simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame. *Combust. Flame* vol. 159, pp. 621–637.
- [165]. GRI-MECH 3.0. (2016) Smith, G.P., Golden, D.M. Frenklach, M. Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S. Gardiner, W.C. Jr., Lissianski, V.V. and Zhiwei Q. [accessed Jun 9, 2016]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [166]. Miller, J.A., Bowman, C.T. (1989). Mechanism and modelling of nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Sciences*, vol. 15, no. 4 pp. 287-338.
- [167]. Jones, W.P. and Lindstedt, R.P. (1988). Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, vol. 73 no.3 pp. 233-249.

- [168]. Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion*. 1st ed. Cambridge: Cambridge University Press. ISBN 0-511-01927-0
- [169]. Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.W. *Combustion*. (2006). Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. Fourth edition ed. Springer, ISBN 3-540-25992-9.
- [170]. Westbrook, C.K. and Dryer, F.L., (1981) Ssimplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuel in Flames. *J. of Combustion Science and Technology*, vol. 27, pp. 31-43.
- [171]. Westbrook, C.K. (1985). Applying chemical kinetics to natural gas combustion problems. Report N. PB-86-168770/XAB, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, Cal, USA.

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES

7	CONCLUSIONES	251
7.1	CONCLUSIONES GENERALES	251
7.2	CONCLUSIONES DE LA REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.....	252
7.3	CONCLUSIONES DE LOS MODELOS ISOTERMOS RANS	253
7.4	CONCLUSIONES ACERCA DEL ANÁLISIS PARAMÉTRICO Y EL ESTUDIO DEL FLUJO.	254
7.5	CONCLUSIONES DE LOS MODELOS ISOTERMOS LES	255
7.6	CONCLUSIONES SOBRE EL ANÁLISIS REACTIVO.....	256
7.7	TRABAJOS FUTUROS	257

7 CONCLUSIONES

Las conclusiones de las investigaciones realizadas acerca de la aerodinámica, la turbulencia y la combustión no premezclada en quemadores de flujo rotante se resumen en este capítulo. Primeramente se presentan las conclusiones generales y posteriormente se detallan por temas.

Finalmente se indican los posibles trabajos futuros dentro de esta línea de investigación.

7.1 Conclusiones generales

Se puede concluir de forma general, que este trabajo, el primero dentro de la línea de investigación del grupo de mecánica de fluidos de la Universidad de Valladolid, ha sentado las bases y la metodología del modelado numérico isoterma o reactivo en quemadores de flujo rotante. Para ello han sido necesarios 89 modelos isotermos RANS, 19 modelos isotermos LES y 14 modelos de combustión.

A continuación, se detallan las principales conclusiones de esta tesis:

Se han diseñado y optimizado dos generadores de swirl distintos. Uno más sencillo, de placas planas y otro más complejo, de aletas curvas, con menor pérdida de carga.

La evaluación del número de swirl es compleja y depende significativamente de la correlación empleada. Esto dificulta la validación experimental de los modelos numéricos.

Los modelos RANS conllevan un error medio situado entre un 13% y un 26% aproximadamente, debido al carácter anisótropo de las grandes zonas de recirculación. Éste se considera aceptable para estudiar las tendencias principales del flujo, así como para realizar estudios de sensibilidad.

Los resultados de la fase relativa al desarrollo, optimización y análisis de generadores de swirl mediante modelos RANS (Capítulos 3 y 4), se han publicado en una revista del JCR: Teresa Parra-Santos, J.R. Pérez-Domínguez, R.Z. Szasz, F. Castro-Ruiz, (2015) "An isothermal analysis of curved-vane and flat-vane swirlers for burners", *Engineering Computations*, Vol. 32 Iss: 3, pp.668-686.

La capacidad de simular llamas turbulentas no premezcladas con el código Ansys Fluent y con el código OpenFOAM mediante RANS y LES es adecuada.

Un modelo LES implícito (sin modelo SGS y empleando el nuevo algoritmo SSD), se ha validado realizando simulaciones en clústeres de cálculo de la Red Española de Supercomputación (BSC).

Se ha realizado con éxito un análisis POD y se ha caracterizado el PVC, obteniéndose un número de Strouhal de 2.8.

Una pequeña estructura de vórtices, relacionada con las inestabilidades de Couette-Taylor, ha sido descubierta gracias a las simulaciones LES. Se asocia a números de swirl bajos y medios.

El incremento del número de swirl, aumenta la IRZ y reduce la ORZ. Además las dos zonas de recirculación se mueven aguas arriba y el espesor de la llama disminuye.

El uso de difusores cónicos reduce o elimina la ORZ. Existe un semiángulo de difusor intermedio que optimiza el mezclado y aumenta la IRZ.

El modelo de combustión PDF, tiene un coste computacional bajo y proporciona un buen ajuste respecto a resultados experimentales de temperatura adiabática de llama, calculada según química GRI-MECH.

La IRZ tiene forma de bulbo. La ORZ tiene forma toroidal si el flujo es isoterma. En caso de flujo reactivo la forma de la IRZ es toroidal, mientras que la forma de la ORZ se mantiene.

Se detecta una reducción del número de swirl, situada entre un 10% y 27%, en caso de tener flujo reactivo. Esto se debe a la expansión de los productos de combustión y al precalentado del aire de la tobera exterior.

7.2 Conclusiones de la revisión bibliográfica

Después de una revisión detallada sobre los aspectos más importantes de la combustión en flujos reactivos, se ha mostrado una clasificación de la combustión, los parámetros más significativos y las principales características y tratamientos asintóticos de la combustión premezclada y no premezclada.

Al revisar los métodos de estabilización de llama actuales, se deduce que ésta es fundamental para garantizar un buen mezclado y evitar la extinción de la llama. Se describe la combustión en flujos rotantes, así como sus características, casos de referencia y los fundamentos del mezclado turbulento.

Los quemadores de flujo rotante, objeto de la tesis, se encuadran dentro de la combustión no premezclada con un elevado número de Damköhler, por lo que es factible asumir la hipótesis de reacción instantánea siendo el mecanismo de mezclado el que domina la reacción.

Se muestran los principales modelos de simulación de la combustión atendiendo a criterios como la velocidad de reacción o la configuración del flujo.

Se pueden agrupar los modelos de simulación en tres grandes grupos: los basados en la descripción del mezclado, los que determinan de la estructura geométrica de llama y los modelos que emplean técnicas estadísticas.

El análisis POD y la determinación de estructuras coherentes como el PVC son descritos brevemente.

La revisión ha permitido seleccionar la metodología a utilizar en este trabajo.

7.3 Conclusiones de los modelos isoterms RANS

Se ha desarrollado un modelo isoterms mediante CFD validado con los experimentos de Palm et al. (2005) y Roback et al. (1983).

Han sido necesarios hasta 56 modelos isoterms RANS para determinar el modelo de turbulencia, mallado y geometría óptimos, lo que denota la complejidad numérica relacionada con el diseño de experimentos, simulación y postprocesado de modelos.

El tamaño de malla óptimo es de aproximadamente 1.6 millones de celdas y se ha estimado en base al número de swirl, tamaño de la zona de recirculación interior (IRZ) y al perfil de velocidades. Las mallas creadas son estructuradas en un 75% del dominio. Dicha malla comete un error de discretización calculado según la extrapolación de Richardson menor al 1%.

Dos enfoques distintos han sido empleados para el tratamiento del generador de swirl. El primero asumiendo la hipótesis de guiado perfecto, con un generador de swirl ideal y el segundo con un generador de swirl 3D.

El modelo de turbulencia que mejor ajusta de los 16 analizados es el k- ϵ RNG swirl dominated. Dicho modelo es óptimo para flujos rotantes, ya que dispone de un parámetro que ajusta la viscosidad turbulenta. Un análisis paramétrico ha determinado que 0.001 es el valor de dicho parámetro que mejor ajusta.

Se han simulado 10 casos distintos para obtener el esquema de discretización óptimo. Se concluye que el mejor esquema es el de segundo orden.

Se han diseñados dos generadores de swirl distintos. Uno de placas planas y uno de aletas curvas que disminuye las pérdidas por choque. Ambos dispositivos se han modelado con dos códigos CFD distintos, Ansys-Fluent y OpenFOAM.

Se ha puesto de manifiesto la falta de homogeneidad en la literatura para evaluar el número de swirl, lo que dificulta la validación experimental. Se han comparado varias correlaciones (Sheen et al, 1996) (Oystein, 2004) Durox et al. (2013) con un generador de swirl experimental y con los dos diseños propios obteniendo notables diferencias.

Se validó el modelo numérico mediante la comparativa de éste frente a dos resultados experimentales. En dichos experimentos se realizaron mediciones láser para obtener la velocidad. Palm et al. (2005) estudia números de swirl de 0.6 y 1.2, mientras que Roback et al. (1983) analizan un número de swirl de 0.45 aproximadamente.

Las tendencias del flujo están capturadas correctamente en las simulaciones CFD. Las predicciones numéricas son más precisas para posiciones axiales pequeñas, ya que el flujo viene más condicionado por las condiciones de contorno, la generación de la capa límite y la mezcla de los chorros aun es incipiente.

La validación de los resultados numéricos de Palm et al. (2005) se realizó con Ansys Fluent y un generador de swirl de aletas curvas. Las diferencias de velocidad

máxima se sitúan entre un 16% y un 32%, mientras que las relativas al tamaño radial de la IRZ oscilan entre un 19% y un 21%.

La validación de los resultados numéricos de Roback et al. (1983) se hizo con Ansys Fluent y OpenFOAM empleando generadores de swirl de aletas curvas y placas planas. Las diferencias medias de velocidad máxima se sitúan entre un 12% a un 25% mientras que las correspondientes a la longitud axial de la IRZ son entre un 6% a un 25%.

De forma general se obtienen menores errores que los obtenidos en la validación de Palm et al. (2005). La estimación de la longitud axial de la IRZ es similar entre códigos, mientras que se encuentran diferencias significativas entre generadores de swirl.

Estas diferencias pueden ser atribuibles a la estimación del número de swirl de los casos experimentales y numéricos, debido a la variabilidad entre correlaciones y a la anisotropía de las zonas de recirculación. Además mecanismos como el PVC o ciertas inestabilidades no pueden ser capturadas por los modelos RANS.

7.4 Conclusiones acerca del análisis paramétrico y el estudio del flujo.

Una vez validado el modelo isoterma, se ha creado otro parametrizado en Workbench para realizar un diseño cuidado del generador de swirl y del difusor de la cámara de combustión.

Se ha establecido una metodología de trabajo para la optimización y el análisis paramétrico, puesto que ha sido necesario simular hasta 33 casos distintos para obtener la influencia del ángulo de salida, la envergadura y número de aletas. El número de swirl es independiente de la longitud de la cuerda. El incremento del número de aletas proporciona números de swirl más altos debido al mejor guiado. Por último, se concluye que el número de swirl en ambos generadores de rotación se controla de acuerdo al ángulo de salida.

El generador de rotación de aletas curvas induce un número de swirl menor que el de placas planas, pero genera menores pérdidas de carga y flujos secundarios.

Otros análisis paramétricos revelan que el flujo aguas abajo del generador de swirl es independiente de la dirección de entrada del fluido a la tobera exterior y del tamaño de la cámara de ensayo.

El fenómeno de ruptura del vórtice o *vortex breakup* induce las zonas de recirculación interior (IRZ) y exterior (ORZ) y la capa de cortadura. Los vórtices de la IRZ y la ORZ son contrarrotantes.

Números de swirl bajos no producen IRZ, mientras que si se incrementa éste se origina una succión tal que se induce la IRZ. La ORZ se reduce a medida que aumenta el número de swirl. La IRZ tiene forma de bulbo y la ORZ toroidal. Entre ambas tendencias no existe un número de swirl crítico fijo, sino que existe un rango de transición entre tendencias.

La macromezcla ha sido analizada mediante el postprocesado los resultados. Se obtiene el tiempo de residencia del fluido, con una ecuación de conservación adicional que se puede relacionar con la formación térmica de NO_x . El tiempo de residencia aumenta con el número de swirl y disminuye con el uso de difusores.

La micromezcla fue analizada mediante el modelo de Baldyga (1989) implementado por Fernández-Moguel (2009), concluyéndose que el generador de swirl de aletas curvas proporciona un mejor comportamiento axilsimétrico que el de placas planas.

7.5 Conclusiones de los modelos isoterms LES

Las técnicas RANS pueden predecir el flujo medio, pero inestabilidades como el PVC, fluctuaciones de presión, flashback de llama, puntos calientes, o apagado deben ser tratadas con flujo transitorio y mucho más grado de detalle, por lo que el modelo LES es un candidato óptimo para ello.

Hasta 19 casos con LES han sido analizados en un clúster de cálculo de la Red Española de Supercomputación (BSC).

Se ha determinado que el tamaño de malla óptimo se sitúa en torno a los 10 millones de celdas, ya que mallas más gruesas no consiguen extraer más energía turbulenta de la corriente principal.

Se ha aplicado el modelo LES con éxito en dos códigos CFD (Ansys Fluent y OpenFOAM) y con dos submodelos distintos (Smagorinsky y ILES SSD).

Se ha validado un modelo implícito LES (ILES) en conjunto con el algoritmo SSD, mediante la comparativa de las tres componentes de la velocidad frente a los resultados experimentales de Roback et al. 1983.

Para realizar el análisis del flujo mediante LES se recomienda disponer de una simulación completamente convergida y realizar un promediado temporal en un ciclo completo, porque el análisis del flujo a través de variables instantáneas es muy complejo.

El análisis LES ha permitido descubrir nuevos vórtices del flujo. Éstos aparecen dentro de la ORZ, son contrarrotantes y análogos a los que producen en el fenómeno de inestabilidades de Taylor-Couette. Este fenómeno se debe a la velocidad relativa entre el chorro rotante de la tobera exterior y la pared fija de la cámara. Dichos vórtices solo tienen lugar para números de swirl bajos y medios.

Los criterios Q y λ_2 de visualización de vórtices y de las estructuras más energéticas se han empleado con éxito sobre los modelos LES de Smagorinsky y ILES SSD.

El análisis en el dominio de la frecuencia de modelos LES verifica la decadencia de la energía turbulenta a través de las distintas escalas. Se logra capturar la pendiente $-5/3$ de la gama inercial y la pendiente 2 de la energía que contienen las macroescalas. La hipótesis de Taylor de turbulencia congelada fue necesaria para

muestrear la fluctuación de una variable durante un cierto período de tiempo y luego convertir la señal temporal a espacial.

El análisis POD sobre dos secciones axiales y una transversal ha puesto de manifiesto que los modos con alta energía se acoplan por pares de casi igual energía.

El análisis transitorio permite concluir que el flujo no es axilsimétrico, debido a que el centro instantáneo de rotación de la IRZ no se encuentra en el eje de la cámara, lo que identifica el fenómeno del *Precessing Vortex Core* (PVC). El centro de torbellino gira alrededor del eje con un número de Strouhal alrededor de 2.83.

La influencia del número de swirl es similares a las de modelos RANS. El aumento del número de swirl incrementa la IRZ y mueve aguas arriba a la ORZ y a la primera. También aumenta el ángulo de apertura del chorro y se reduce la capa de cortadura con el aumento del número de swirl.

Los difusores aumentan el tamaño de la IRZ y disminuyen la ORZ. Además la fuerza centrífuga asociada a la rotación, mueve el fluido hacia la pared del difusor, por lo que es más difícil la separación de la capa límite.

Semiángulos de difusor de 45° y 70° que minimizan la IRZ (números de swirl de 0.6 y 1.2 respectivamente). Para ángulos menores de 60° y 80°, la ORZ desaparece (números de swirl de 0.6 y 1.2 respectivamente)

El análisis de la micromezcla en modelos LES indicó que el aumento del número de swirl mejora notablemente el mezclado y que el difusor lo hace ligeramente. Además se relaciona el punto de desaparición de la ORZ con un mejor mezclado, ya que difusores de 70° y 80° inducen una mejor mezcla para número de swirl de 0.6 y 1.2 respectivamente.

7.6 Conclusiones sobre el análisis reactivo

La combustión no premezclada en flujos turbulentos es una de las configuraciones más empleadas por su seguridad, aunque no existe una metodología clara de simulación y validación.

Se ha desarrollado un modelo de simulación de la combustión mediante técnicas RANS. Las celdas tetraédricas no son recomendables en el flujo reactivo, puesto que predicen la llama aguas arriba de la capa de cortadura, lo cual es irrealista.

Se comparan los modelos de combustión Eddy Dissipation, Eddy Dissipation Concept y el PDF frente a la temperatura adiabática de llama calculada según química GRI-Mech.

Se asume la hipótesis de pérdidas de calor nula, para que la comparativa sea más fiable en la zona de la llama, aunque la dificultad de validación sigue siendo alta, ya que en el contexto de llamas no premezcladas, ésta se comporta localmente como rica o como pobre.

Se emplearon tres mecanismos de reacción simplificados (Westbrook, 1981, Franzelli 2012 y Jones y Linstedt 1987) de una, dos y cuatro reacciones

respectivamente en conjunto con el modelo EDC. No se han obtenido diferencias significativas entre dichos mecanismos.

El modelo PDF tiene un consumo de recursos computacionales razonable, ya que la cinética química se aporta de forma tabulada en el preproceso y se resuelven solo dos ecuaciones de conservación adicionales. Además proporciona un buen ajuste respecto a resultados experimentales. Ésto lo convierte en un modelo robusto y apto para realizar análisis de sensibilidad.

Se ha descrito la estructura termoquímica de la llama y el patrón de flujo, mediante el modelo PDF. El patrón de flujo cambia significativamente respecto a los análisis isoterms. El precalentado del aire que circula por la tobera exterior reduce la cantidad de movimiento del chorro con rotación. La combustión produce una expansión en los productos de reacción, incrementando la velocidad axial considerablemente. Estos efectos producen una reducción del número de swirl de modelos reactivos (entre un 10% y un 27%). La IRZ adquiere forma toroidal (en caso de flujo isoterms tiene forma de bulbo). La ORZ se mueve aguas abajo. La IRZ se relaciona con los productos de reacción y la ORZ se asocia a los reactivos. La varianza de la fracción de mezcla y la disipación de energía cinética turbulenta pueden ser una herramienta indicadora del progreso de la reacción.

Las emisiones NO_x son altas puesto que no se han considerado pérdidas de calor ni radiación.

El incremento del número de swirl se asocia a la disminución del espesor de la llama. En caso de tener bajo número de swirl, se tienen grandes zonas de mezclado y reacción. Números de swirl altos proporcionan una temperatura mucho más alta en la pared y mayores gradientes. También ocurre que el aumento del número de swirl sitúa la IRZ y la ORZ aguas arriba y aumenta el tamaño de la primera, pero disminuye el de la segunda.

Se ha determinado una metodología numérica para modificar el dosado sin modificar la cantidad de movimiento de los chorros. De esta forma se puede desacoplar el efecto aerodinámico del termoquímico. La influencia del dosado sobre las velocidades axiales es mínima. No se puede establecer conclusiones claras acerca de la formación de NO_x y del dosado, ya que la temperatura es alta, debido a la consideración de paredes adiabáticas.

Los difusores impiden la ORZ. Existe un ángulo límite a partir del cual el efecto proporcionado por el difusor desaparece. La IRZ en difusores de 60° aumenta considerablemente.

7.7 Trabajos futuros

A continuación se muestran algunos de los posibles trabajos futuros dentro de la línea de investigación:

La construcción de un modelo experimental sería prioritaria para poder validar los modelos de combustión simulados, pero el coste es elevado y se requieren infraestructuras muy especializadas para la medida como PDA o el PIV.

El tratamiento de la combustión con cinética detallada tiene un coste computacional muy alto por lo que el uso acoplado de Chemkin con OpenFOAM o Ansys Fluent podría permitir la simulación de mecanismos semidetallados o detallados en clústeres de supercomputación para determinar con precisión el efecto de la química en la llama.

Las inestabilidades de la combustión pueden generar vibraciones, fatiga, reducción de la transferencia de calor, reducción del rendimiento o aumento de las emisiones contaminantes. El estudio de la interacción fluido-estructura, el uso de modelos LES acoplados a modelos de combustión y el análisis transitorio termoacústico podrían ayudar a reducir dichas inestabilidades.

Se ha comprobado que la consideración de pérdidas de calor nulas a través de las paredes ocasiona una alta generación de NO_x . Se propone implementar transmisión de calor por las paredes e incorporar la transmisión de calor por radiación con el método de ordenadas discretas para disponer de unos resultados más realistas.

En turbinas de gas y grandes quemadores se dispone de entradas secundarias y terciarias de aire, por lo que sería interesante analizar el efecto que producen en el flujo.

El uso del modelo EDC con modelos semidetallados puede proporcionar una óptima estimación de los de óxidos de nitrógeno.

El número de swirl regula las zonas de recirculación y por consiguiente el tiempo residencia, que a su vez se relaciona con la generación de los óxidos de nitrógeno. Establecer el número de swirl que minimice los óxidos de nitrógeno sería muy útil para el diseño y optimización de los quemadores de flujo rotante.

