



Universidad de Valladolid



ESCUELA DE INGENIERÍAS  
INDUSTRIALES

Máster en Ingeniería Industrial

**MASTER EN INGENIERÍA INDUSTRIAL**  
**ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES**  
**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**

**TRABAJO FIN DE MÁSTER**

**ESTUDIO Y VALIDACIÓN DE UN MODELO DE COMBUSTIÓN  
DE UN QUEMADOR DE FLUJO ROTANTE, ANALIZANDO LA  
INFLUENCIA DE LA RADIACIÓN Y EMISIONES DE NOX**

Autor: D. Jorge Jesús Tamame Mongil  
Tutor: D<sup>a</sup>. María Teresa Parra Santos

Valladolid, Febrero, 2020



## **Resumen**

Los quemadores de flujo rotante de gas natural son ampliamente utilizados en la actualidad, ya que presentan una serie de ventajas respecto a otro tipo de quemadores, como reducción de consumos, mantenimientos y emisiones contaminantes. En este trabajo se ha realizado un análisis CFD de dicho quemador, partiendo de un modelo de mezcla sin reacción, y simulando la combustión utilizando para ello el modelo de combustión EDC y el modelo PDF, seleccionando finalmente el PDF para realizar el resto de simulaciones. Seguidamente, y ante la falta de antecedentes que lo hubieran realizado previamente, se ha realizado un estudio de la influencia de la radiación sobre dicho modelo PDF, viendo que ésta sí que afecta en gran medida a los resultados, lo que resalta el carácter innovador de este trabajo. A continuación, se ha realizado un análisis de las emisiones de NO<sub>x</sub> de dicho modelo, algo que nuevamente no había realizado ningún antecedente de este trabajo, y se ha comprobado la importancia que tiene la temperatura en la generación de dichas emisiones. Posteriormente, se ha validado el modelo de mezcla sin reacción con los resultados experimentales de Roback & Johnson, y se han comparado los resultados del modelo de combustión PDF con dichas medidas experimentales, explicando el porqué de sus diferencias. Por último, también se han comparado los resultados de este estudio con los obtenidos numéricamente o experimentalmente por otros autores, viendo cómo las diferentes configuraciones de quemadores afectan en gran medida a los resultados.

## **Palabras Clave**

Flujo rotante, número de swirl, modelado numérico, radiación, emisiones de NO<sub>x</sub>

## **Abstract**

Natural gas rotary flow burners are widely used nowadays, since they present a series of advantages over other types of burners, such as reduced consumption, maintenance and polluting emissions. In this paper, a CFD analysis of this burner has been carried out, starting from a mixture model without reaction, and simulating the combustion using the EDC combustion model and the PDF model, finally selecting the PDF to continue with the rest of the simulations. Next, and in view of the lack of background information, a study of the influence of radiation on this PDF model has been done, and it has been seen that this does affect the results to a great extent, which highlights the innovative nature of this work. Subsequently, an analysis of the NO<sub>x</sub> emissions from this model have been carried out, something that had not been done previously in this work area, and the importance of temperature in the generation of these emissions was verified. Afterwards, the unreacted mixture model was validated with the experimental results of Roback & Johnson, and the results of the PDF combustion model were compared with these experimental measurements, explaining the reasons for their differences. Finally, the results of this study have also been compared with those obtained numerically or experimentally by other authors, seeing how the different burner configurations affect the results to a great extent.

## **Key words**

Rotary Flow, swirl number, numerical modeling, radiation, NO<sub>x</sub> emissions



## ***Agradecimientos***

En primer lugar, quiero agradecer a mi familia en general, y a mis padres en particular, el haber hecho posible que haya llegado hasta aquí y haya podido finalizar tanto el Grado como el Máster satisfactoriamente.

Especial mención a mis abuelos Ezequiel y Emeterio que, aunque ya no estén con nosotros, sé que les habría hecho mucha ilusión ver a su nieto con todos sus estudios universitarios terminados y trabajando en algo que realmente le gusta.

Agradecer también a todos mis amigos, tanto de la universidad como de fuera de ella, el apoyo que me han brindado todos estos años, y con los que he vivido experiencias inolvidables durante mi etapa universitaria.

Por último, me gustaría agradecer a Teresa Parra toda su implicación durante estos meses para la realización del trabajo, y desearle todo lo mejor en su nueva etapa que acaba de comenzar como Vicerrectora de Ordenación Académica de la Universidad de Valladolid.

¡Muchas gracias a todos!



# ÍNDICE

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Presentación .....	1
1.2. Justificación.....	1
1.3. Antecedentes .....	3
1.4. Objetivos .....	3
1.5. Estructura de la memoria .....	4
CAPÍTULO 2. MODELO FÍSICO Y NUMÉRICO .....	5
2.1. Descripción física del modelo .....	5
2.1.1. Número de Swirl .....	6
2.2. Modelo numérico .....	6
2.2.2. Resolución numérica de las ecuaciones de la mecánica de fluidos .....	7
2.2.3. Modelo de turbulencia empleado.....	8
2.2.4. Modelos de combustión.....	10
2.2.5. Modelo de radiación .....	13
2.3. Condiciones de contorno empleadas.....	14
2.3.1. Entrada/salida.....	14
2.3.2. Modelos .....	14
2.3.3. Materiales .....	15
2.3.4. Algoritmos, esquemas y orden .....	15
CAPÍTULO 3. INFLUENCIA DE DISTINTOS MODELOS DE COMBUSTIÓN: EDDY DISSIPATION CONCEPT VS PROBABILITY DENSITY FUNCTION PARA MEZCLA ESTEQUIOMÉTRICA.....	17
3.1. Contornos de temperatura.....	17
3.2. Contornos de velocidad axial y líneas de corriente .....	20
3.3. Especies químicas.....	25
3.4. Selección del modelo.....	29
CAPÍTULO 4. INFLUENCIA DE LA RADIACIÓN PARA DISTINTAS ESTEQUIOMETRÍAS .....	31
4.1. Contornos de temperatura.....	31
4.2. Contornos de velocidad axial y líneas de corriente .....	39
4.3. Especies químicas.....	48
CAPÍTULO 5. ANÁLISIS DE NOX.....	59
CAPÍTULO 6. COMPARACIÓN CON OTRAS FUENTES.....	63
6.1. Estado del arte .....	63
6.2. Roback R., Johnson B. V., 1983.....	64
6.2.1. Velocidad del flujo.....	64
6.2.2. Especies químicas.....	69

6.3. Janus B., Dreizler A., Janicka J., 2007 .....	70
6.3.1. Velocidad del flujo.....	71
6.4. Wegner B., Janus B., Sadiki A., Dreizler A., Janicka J., 2005 .....	74
6.4.1. Velocidad del flujo.....	75
6.5. Meier W., Keck O., Noll B., Kunz O., Stricker W., 2000.....	77
6.5.1. Velocidad del flujo.....	77
6.5.2. Especies químicas.....	88
6.6. Choi M., Park Y., Li X., Sung Y., Park S., Moon K., Choi G., 2019.....	90
6.6.1. Emisiones de NOx .....	91
CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS.....	93
7.1. Modelo de combustión.....	93
7.2. Radiación.....	93
7.3. Análisis de NOx .....	94
7.4. Comparación con otras fuentes.....	94
7.5. Trabajos futuros.....	95
BIBLIOGRAFÍA.....	97
ANEXOS.....	101
Modelo EDC .....	101
Modelo PDF.....	111
Modelo PDF con radiación .....	124
Modelo EDC con NOx .....	138







## **Acrónimos**

CFD (*Computational Fluid Dynamics*) Dinámica de Fluidos Computacional

DNS (*Direct Numerical Simulation*) Simulación Numérica Directa

ED (*Eddy Dissipation*)

EDC (*Eddy Dissipation Concept*)

IRZ (*Inner Recirculation Zone*) Zona de Recirculación Interior

LES (*Large Eddy Simulation*)

NO<sub>x</sub> (*Nitrogen Oxides*) Óxidos de Nitrógeno

ORZ (*Outer Recirculation Zone*) Zona de Recirculación Exterior

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

RAD (*Radiation*) Radiación

RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*)

RXN (*Reaction*) Reacción



# CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

---

## 1.1. Presentación

En este capítulo se presentarán los principales objetivos, antecedentes y justificación del presente Trabajo Fin de Máster. Además, también se incluye un breve resumen explicativo de la estructura en la que se desarrollará la memoria.

En este trabajo se pretende estudiar la combustión de metano ( $\text{CH}_4$ ) en el interior de un quemador compuesto por una cámara de combustión y dos toberas coaxiales con flujo rotante únicamente en una de ellas (la exterior), por la que circula el aire, siendo el combustible el que circulará por la interior. Este estudio se abordará por medio de simulación numérica CFD (Computational Fluid Dynamics), utilizando el software Ansys Fluent® 14.5. Los resultados de estas simulaciones se contrastarán con otros modelos y/o medidas experimentales realizadas por otros autores.

Un quemador se puede definir como una máquina térmica capaz de transformar la energía química contenida en un combustible en energía térmica mediante el proceso químico de la combustión. Esta transformación de energía se refleja en un aumento de la temperatura de salida de los compuestos químicos salientes respecto de los entrantes.

El planteamiento de este problema surge a raíz del informe presentado por Roback y Johnson [Roback, 1983], que se utilizará como base en todo el trabajo, si bien ellos no estudiaron el fenómeno de la combustión, sino que únicamente estudiaron los patrones de flujo.

## 1.2. Justificación

Actualmente, vivimos en un mundo en el que el modelo de generación de energía está cambiando. La concienciación de los seres humanos por el medio ambiente crece cada día más y las restricciones por parte de los gobiernos de los distintos países por regular las emisiones de gases contaminantes son cada vez mayores. Esto no solo afecta al ámbito del transporte, sino que también afecta a las industrias e incluso al ámbito doméstico.

Por ello, es importante analizar los procesos de combustión de cara a tratar de optimizarlos, para que esta energía se transforme eficientemente y se generen la mínima cantidad de emisiones contaminantes, principalmente  $\text{CO}_2$  y  $\text{NO}_x$ , este último algo más complejo de analizar por depender de parámetros menos intuitivos como el tiempo de residencia del combustible en la cámara de combustión [Pérez, 2016].

El combustible elegido para este trabajo es el  $\text{CH}_4$ , junto con un aditivo de similares características termodinámicas, estudiado por [Pastor, 2017]. El motivo de emplear  $\text{CH}_4$  es el hecho de tratarse del componente principal del gas natural, uno de los combustibles fósiles más sencillos que existen, y que emiten menos contaminantes a la atmósfera en comparación con el resto de combustibles fósiles. Por ello, es considerado como una fuente de energía más limpia que la gasolina u otros derivados del petróleo o del carbón.

Bob Dudley, Presidente Ejecutivo del Grupo BP, al presentar la edición 2017 del Informe Estadístico Mundial de Energía de BP, dijo:

**“2017 fue un año donde las fuerzas estructurales en el mercado de la energía continuaron impulsando la transición a una economía de menor carbono, pero donde factores cíclicos han revertido o desacelerado algunas de las ganancias de años anteriores. Estos factores, combinados con la creciente demanda de energía, han resultado en un aumento cuantificable de las emisiones de carbono después de tres años de poco o nulo crecimiento” [BP, 2018]**

El auge de países como China e India están aumentando la demanda de energía a nivel mundial. Sin embargo, la mayor parte de la energía que generan procede del carbón, una de las fuentes más contaminantes. Si bien China está comenzando a sustituir algunas de sus centrales de carbón por centrales de gas natural, todavía no es suficiente. En el año 2017, el consumo de gas natural creció un 3%, así como su producción, que creció un 4%, impulsado principalmente por este hecho [BP, 2018].

En el informe *World Energy Outlook (WEO)* de 2018, elaborado por la *International Energy Agency (IEA)*, se propone que la producción de energía procedente del carbón debería disminuir en los próximos años, para alcanzar los objetivos necesarios para abordar el cambio climático. Las energías renovables deberían aumentar drásticamente su producción, en detrimento de las no renovables, a excepción del gas natural. Como se observa en la Fig. 1.1, la única fuente no renovable que debería aumentar su producción mundial es, junto con la nuclear, el gas natural. De ahí la importancia de optimizar los procesos de combustión de dicho combustible.

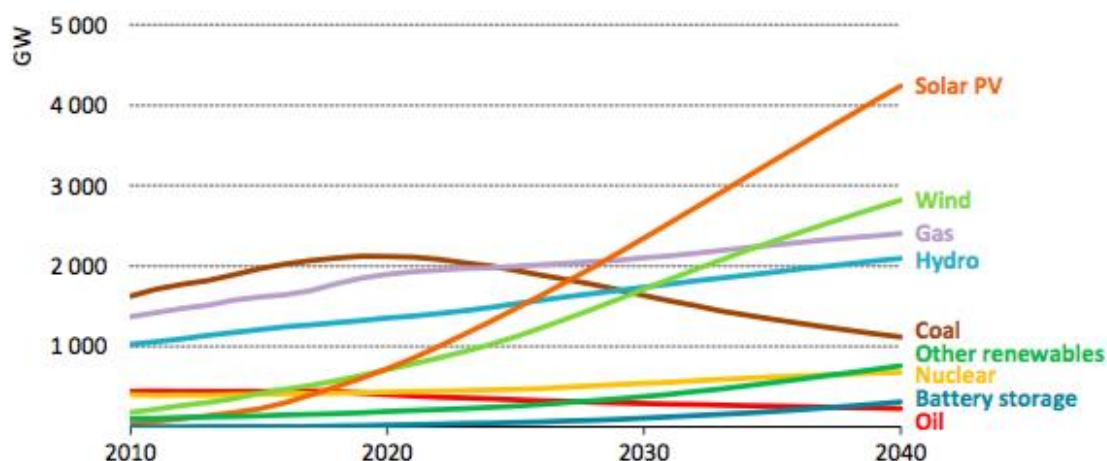


Fig. 1.1. Potencia instalada total a nivel mundial para generación de energía, para un escenario de un futuro sostenible [IEA, 2018]

En cuanto a la elección del modelo de quemador de flujo rotante utilizado por Roback & Johnson, se ha debido a que ofrece una serie de ventajas respecto a otras configuraciones. Algunas de dichas ventajas son:

1. Ausencia de *bluff body*. Un *bluff body* consiste en posicionar un obstáculo en la descarga de las toberas, de tal manera que se generan turbulencias que hacen que se produzca una mejor mezcla entre combustible y comburente. Sin embargo, añadir un *bluff body* implica que se generan más cenizas, por lo que el quemador requiere un mayor mantenimiento, y además es necesario elegir un material que resista muy bien las condiciones de alta temperatura que se alcanzan en la cámara de combustión [Subramanian, 2010].
2. Evitar flujos en contracorriente. Otra forma de conseguir que combustible y comburente se mezclen adecuadamente es introducir ambos flujos en contra corriente. Sin embargo, este procedimiento genera muchas pérdidas de carga.

3. *Vortex breakdown*. Se trata de un fenómeno característico de este tipo de quemadores de flujo rotante, que ayuda a la estabilidad de la combustión y permite reducir las emisiones contaminantes, el consumo de combustible, las pérdidas de carga, el hollín, etc. [Lucca-Negro, 2001].

### 1.3. Antecedentes

Este estudio viene precedido por el realizado por otros compañeros de la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Valladolid, bajo la tutela de miembros del Dpto. de Ingeniería Energética y Fluidomecánica. Estos son:

- Pérez Domínguez, José Rubén [Pérez, 2016]: Estudió en su tesis doctoral la influencia del modelo de turbulencia y el diseño del generador de Swirl usando perfiles curvos.
- Pastor Alonso, David [Pastor, 2017]: Estudio en su Trabajo Fin de Grado la influencia de la combustión en los patrones de flujo, así como la influencia del aditivo, centrándose principalmente en el modelo EDC.

Todos estos trabajos anteriores adolecían de importantes hipótesis simplificadores, lo que puede afectar a la validez de los resultados. Entre ellas:

- Algunos modelos simulaban únicamente un sector del quemador (90°). Sin embargo, en el modelo 3D que se presenta en este trabajo se simulan los 360° del quemador, a pesar de su alto coste computacional.
- Ninguno de los trabajos anteriores ha comparado el modelo de combustión PDF (*Probability Density Function*) para distintas estequiometrias. En este trabajo sí que se hará.
- En llamas confinadas, numerosos autores defienden la necesidad de considerar la transferencia de calor por radiación térmica [Kim, 2016], [Centeno, 2016] o [Shaddix, 2017]. Este trabajo que se presenta aporta la novedad de ser el primero de este tipo que analiza la influencia de la radiación tanto en temperatura, como en patrones de flujo y especies químicas.
- Las emisiones de NOx son complicadas de simular, puesto que su mecanismo de reacción presenta decenas de reacciones con una cinética muy sensible a la temperatura (un incremento de temperatura en 70°C implica aproximadamente, el doble de emisiones de NOx). En esta memoria se presenta un modelo para estimar las emisiones, considerando la formación de NOx térmica y de reacción.

### 1.4. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es el estudio de la combustión de CH<sub>4</sub> en el quemador utilizado por Roback y Johnson en su estudio [Roback, 1983], centrándose en los siguientes aspectos:

1. Estudio de la influencia del modelo de combustión en los cálculos, y elección y justificación de uno para la realización de las simulaciones posteriores.
2. Planteamiento de un modelo de radiación y observar si existe una gran influencia en los patrones de flujo del quemador, así como en otros aspectos
3. Análisis de las emisiones de NOx

4. Comparación de los resultados obtenidos con los datos experimentales de Roback y Johnson [Roback, 1983] para su validación
5. Comparación de los resultados obtenidos con los obtenidos por otros autores de manera numérica y/o experimental

## 1.5. Estructura de la memoria

La estructura de esta memoria es la que sigue:

- **Capítulo 2:** Se presenta el modelo físico y numérico empleado en este trabajo, así como los diferentes modelos empleados de combustión y radiación.
- **Capítulo 3:** Se analizarán los resultados de los dos modelos de combustión propuestos y se justifica la utilización de uno de ellos para los análisis posteriores
- **Capítulo 4:** Influencia del modelo de radiación en los resultados, así como en la estequiometría de la reacción
- **Capítulo 5:** Se analizan las emisiones de NO<sub>x</sub> del modelo
- **Capítulo 6:** Se procede a la validación del modelo con los resultados experimentales de Roback y Johnson [Roback, 1983], además de comparar los resultados del modelo propuesto con los obtenidos numérica o experimentalmente por otros autores.
- **Capítulo 7:** Conclusiones y trabajos futuros
- **Anexos:** Sumarios proporcionados por el programa Ansys Fluent<sup>®</sup> 14.5 de los modelos numéricos empleados, con el objetivo de poder reproducir las mismas condiciones en el futuro.



# CAPÍTULO 2.

## MODELO FÍSICO Y NUMÉRICO

En este capítulo se presentará una breve descripción física del modelo que se va a considerar a lo largo de los siguientes capítulos, así como una descripción teórica de los modelos computacionales que se han empleado en todo el informe.

### 2.1. Descripción física del modelo

Todas las simulaciones que se llevarán a cabo en este informe están basadas en el quemador utilizado por Roback y Johnson [Roback, 1983]. Este quemador estudiado está compuesto por:

- Dos toberas coaxiales en la parte inicial. Por el interior de la tobera interior (central) circulará el combustible y por la exterior (anular) el comburente, que entrarán en la cámara de combustión. Ambas toberas tienen una longitud de 220 mm. La tobera central tiene un diámetro de 30 mm, mientras que la anular posee un diámetro interior de 32 mm y un exterior de 62 mm. La pared que separa ambas toberas posee, por tanto, un espesor de 1 mm.
  - En la tobera anular, a 50 mm aguas arriba de la cámara de combustión, se encuentran situados 8 álabes fijos inclinados  $90^\circ$ , los cuales se encargan de proporcionar la componente tangencial a la velocidad del comburente. Este conjunto de álabes se conoce como *generador de Swirl*.
- Una cámara de combustión de 1016 mm de longitud, 122 mm de diámetro y 3 mm de espesor de pared, donde se produce la mezcla y combustión de combustible y comburente.

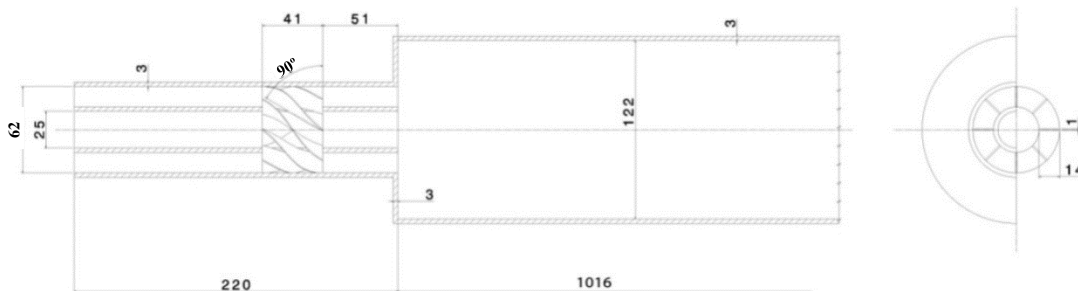


Fig. 2.1. Esquema ilustrativo del quemador de flujo Swirl utilizado en este informe

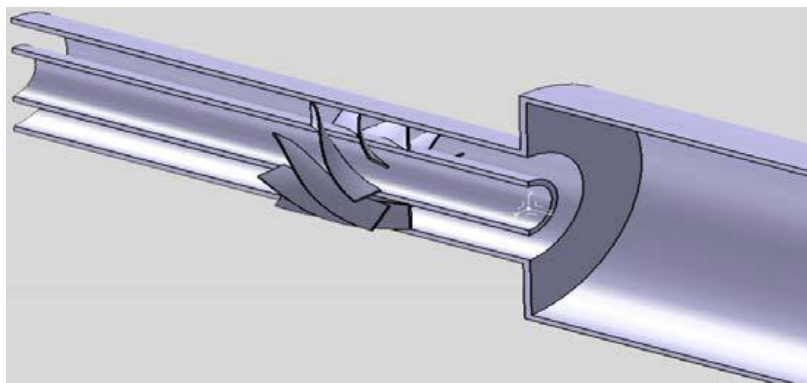


Fig. 2.2. Representación tridimensional del modelo del quemador utilizado en este informe

### 2.1.1. Número de Swirl

Un parámetro de vital importancia en este estudio es el número de swirl. Aunque en este trabajo no se estudia la influencia de dicho parámetro en la combustión, como ya realizó un compañero en anteriores trabajos [Pastor, 2017], es importante conocer el significado físico de dicho parámetro adimensional.

$$S = \frac{\int \rho \cdot v_{\theta} \cdot v_z \cdot 2 \cdot \pi \cdot r^2 \cdot dr}{\frac{d}{2} \cdot \int \rho \cdot v_z^2 \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr} \quad \text{Eq. 2.1}$$

Su significado físico se corresponde con el cociente promediado entre el flujo axial de momento angular y el flujo axial de momento lineal, multiplicados ambos por el radio de salida [Gupta, 1984].

Existe un cierto valor crítico de número de swirl que cuando se supera se genera una zona de recirculación con forma de bulbo en la zona central de la cámara de combustión. Dicha zona es conocida como *Zona de Recirculación Interior (IRZ, Inner Recirculation Zone)*.

Existen varios métodos de generar flujo swirl:

- Mediante el uso de álabes que proporcionen la componente tangencial al flujo
- Introduciendo directamente el flujo en la cámara de combustión en la dirección tangencial
- Combinando entradas de flujo axiales y tangenciales

Tal y como muestra la Fig. 2.1 y 2.2, el método elegido es el de los álabes fijos, situados en este caso, en la tobera anular, por donde circula el comburente.

## 2.2. Modelo numérico

La Mecánica de Fluidos Computacional o CFD (Computational Fluid-Dynamics) es la rama de la mecánica de fluidos que se utiliza para resolver los cálculos que requieren los modelos de este trabajo. Básicamente el CFD se puede entender como “*el arte de sustituir las ecuaciones diferenciales que gobiernan los flujos o reacciones por números, y mover estos números por el espacio o tiempo (en caso transitorio) para obtener una descripción completa de las propiedades del flujo*” [Wendt, 2008]. Los modelos empleados para el estudio de estos eventos se expondrán en este capítulo.

Dicho método de resolución consiste en discretizar el flujo en volúmenes finitos (hecho que se conoce como mallado), en los cuales se resuelven las distintas ecuaciones, obteniendo de esta forma los valores en los nodos de dichos volúmenes.

### 2.2.1. Software y hardware empleado

El software empleado para la resolución de estas ecuaciones de mecánica de fluidos se trata de Ansys Fluent® en su versión 14.5, ejecutados en los ordenadores del Dpto. de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Valladolid.

El hardware empleado consiste en un clúster compuesto por 4 ordenadores idénticos con las siguientes características principales:

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

### 2.2.2. Resolución numérica de las ecuaciones de la mecánica de fluidos

Las ecuaciones que será necesario resolver en este modelo son:

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

Para poder resolver estas ecuaciones es necesario modelarlas para poder resolverlas por medio de un ordenador. Se comienza definiendo la ecuación genérica de la mecánica de fluidos:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot \phi)}_{\text{Término transitorio}} + \underbrace{\text{div}(\rho \cdot \bar{u} \cdot \phi)}_{\text{Término convectivo}} = \underbrace{\text{div}(\Gamma_{\phi} \cdot \text{grad } \phi)}_{\text{Término difusivo}} + \underbrace{S}_{\text{Término fuente}} \quad \text{Eq. 2.2}$$

Donde:

- $\phi$  es una propiedad específica del fluido considerado
- $\rho$  es la densidad del fluido
- $\bar{u}$  es el vector velocidad
- $\Gamma$  es el coeficiente de difusión de la propiedad  $\phi$

Desarrollando esta ecuación genérica, se obtienen las ecuaciones nombradas anteriormente:

- Ecuación de conservación de la masa ( $\phi = 1$ ):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \cdot u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \cdot v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \cdot w) = 0 \quad \text{Eq. 2.3}$$

Donde u, v, w son las velocidades en los ejes x, y, z, respectivamente.

- Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento ( $\phi = \bar{u}$ ):

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \cdot u^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \cdot v \cdot u) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \cdot w \cdot u) &= f_{vx} + f_{sx} \\ \frac{\partial(\rho \cdot v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \cdot u \cdot v) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \cdot v^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \cdot w \cdot v) &= f_{vy} + f_{sy} \\ \frac{\partial(\rho \cdot w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \cdot u \cdot w) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \cdot v \cdot w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \cdot w^2) &= f_{vz} + f_{sz} \end{aligned} \quad \text{Eq. 2.4}$$

Donde  $f_{vi}$  y  $f_{si}$  son las fuerzas de volumen aplicadas en el sistema considerado.

- Ecuación de la energía ( $\phi = e + V^2/2$ ):

$$\frac{\partial \rho \left( e + \frac{V^2}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \rho \cdot \left( e + \frac{V^2}{2} \right) \cdot u \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \rho \cdot \left( e + \frac{V^2}{2} \right) \cdot v \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \rho \cdot \left( e + \frac{V^2}{2} \right) \cdot w \right] = W_v + W_s + q_{cond} + q_{reacc+rad} \quad \text{Eq. 2.5}$$

- Ecuación de las especies químicas en función de la fracción másica de la especie k-ésima ( $\phi = Y_k$ ):

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

Donde  $Y_k$  es la fracción másica de la especie química k-ésima, y el término fuente se debe a la reacción:  $S_{Yk} = M_k \cdot \omega_k$

### 2.2.3. Modelo de turbulencia empleado

La turbulencia se puede definir como la inestabilidad que se produce en el flujo de un fluido como consecuencia del movimiento aleatorio y tridimensional de las partículas fluidas cuando su número de Reynolds es moderadamente alto (generalmente, superior a 4000). En la mayor parte de las aplicaciones técnicas se utilizan fluidos de baja viscosidad, por lo que la mayoría de los flujos son turbulentos [CFD, 2013].

La turbulencia se genera como consecuencia de los gradientes de velocidad que existen en el flujo, que generan torbellinos, los cuales generan nuevas inestabilidades que generan torbellinos aún más pequeños. Dicho proceso se repite una y otra vez hasta que los torbellinos son tan pequeños que toda su energía se disipa debido a que la viscosidad comienza a adquirir importancia. Dicho fenómeno se conoce como *cascada de energía*.

Existen diversos modelos para tratar de simular el comportamiento de la turbulencia, cada uno con sus ventajas y desventajas. Dependiendo del tiempo de computación del que se disponga, la potencia del procesamiento del ordenador, el nivel de precisión requerido, etc. Se elegirá un modelo u otro.

En función de la escala de energía que se pretenda estudiar, la Fig. 2.3 muestra el modelo que se recomendaría utilizar.

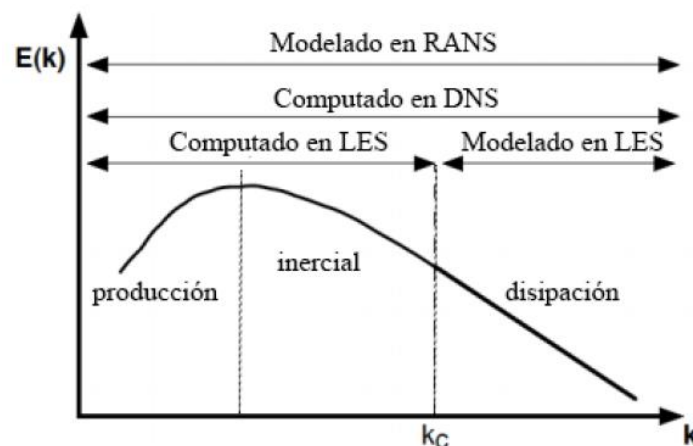


Fig. 2.3. Energía turbulenta según el tipo de modelo a utilizar [Poinsot, 2017]

Debido a los trabajos realizados previamente por [Pérez, 2016], [Escorial, 2015] y [Pastor, 2017], el modelo de turbulencia que se utilizará en este estudio será el k-ε RNG (dentro de los modelados en RANS), el cual se explicará en el apartado siguiente.

### 2.2.3.1. RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)

Dado que en la mayor parte de las aplicaciones industriales se suele estar más interesado en el flujo medio que en los detalles de las fluctuaciones, la turbulencia se trata mediante modelos estadísticos, los cuales tienen inconvenientes y beneficios:

- El principal inconveniente es que en ocasiones la solución puede tener problemas de convergencia, ya que el número de incógnitas es superior al número de ecuaciones. Sin embargo, cada tipo de modelo RANS soluciona esto añadiendo una ecuación de conservación distinta.
- La gran ventaja de este tipo de modelos de turbulencia es que reducen en gran medida el tiempo de computación.

Los modelos de turbulencia de tipo RANS promedian en el tiempo las fluctuaciones turbulentas del campo de velocidades, que previamente ha sido descompuesto en su componente media y componente fluctuante:

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

Las ecuaciones de los modelos RANS son:

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

$$\rho \cdot \bar{u}_j \cdot \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \cdot \bar{f}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ -\bar{\rho} \cdot \delta_{ij} + \mu \cdot \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \cdot \overline{u'_i \cdot u'_j} \right] \quad \text{Eq. 2.9}$$

De esta forma, las nuevas incógnitas serán las tensiones de Reynolds, y no las velocidades.

Ante el inconveniente mencionado anteriormente acerca del problema que presentan los modelos RANS frente a la convergencia, existen diferentes modelos que solucionan este problema, y se encuentran resumidos en la Tabla 2.1.

Como se comentó anteriormente, el modelo más adecuado para el estudio que se va a realizar es el k-ε RNG y, dentro de este modelo, el que mejores resultados proporciona es el *Swirl Dominated Flow (flujo dominado por el Swirl)* [Pérez, 2016]. El modelo es similar al k-ε Standard, pero con algunas opciones adicionales:

- El modelo RNG presenta un término adicional en la ecuación de la disipación turbulenta (ε), de manera que se trata de un modelo más exacto.
- El modelo RNG es más preciso para flujos rotantes, como es el caso de este estudio, ya que incluye el efecto del torbellino.
- Este modelo incluye una ecuación diferencial que tiene en cuenta los efectos de Reynolds bajos. Sin embargo, requiere un buen tratamiento de la pared.
- El modelo RNG utiliza expresiones analíticas para obtener el número de Prandtl; en cambio el k-ε Standard utiliza constantes [Fluent, 2013]

Tabla 2.1. Modelos de turbulencia RANS [Fluent, 2013]

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

#### 2.2.4. Modelos de combustión

Puesto que el quemador que se utilizará en este estudio es un quemador de flujo no premezclado, en este apartado únicamente se explicarán los modelos de combustión para este tipo de flujo, si bien también se nombrarán otros modelos para flujo premezclado. La tabla 2.2 muestra una posible clasificación de algunos de los principales modelos de combustión existentes.

Tabla 2.2. Clasificación de los principales modelos de combustión [Pérez, 2016]

		Configuración de flujo		
		Premezclado	No premezclado	Parcialmente premezclado
Tipo de química	Rápida $Da \gg 1$	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		
		Laminar finite-rate model		
	Lenta $Da \ll 1$	Eddy dissipation concept Model (EDC)		
		Composition PDF transport Model		
		Laminar flamelet model		
		Steady/Unsteady		

En la tabla 2.2, el número de Damköhler ( $Da$ ) es un número adimensional utilizado en el ámbito de la ingeniería química, y cuyo significado físico es el que sigue:

$$Da = \frac{\text{tiempo característico de transporte}}{\text{tiempo característico de reacción}} \quad \text{Eq. 2.10}$$

Por tanto, esto implica:

- $Da \gg 1$  significa que la reacción es rápida; la difusión es más lenta y la reacción está instantáneamente en equilibrio.
- $Da \ll 1$  significa que la reacción es lenta; la difusión es mucho más rápida que la reacción, por lo que la difusión alcanza el equilibrio antes que la reacción.

Flujo no premezclado implica que combustible y comburente circulan por conductos diferentes separados y posteriormente se mezclan en la cámara de combustión, donde además se produce la combustión de dicha mezcla. Esta metodología es ampliamente utilizada debido a la seguridad que aporta: evita explosiones no deseadas antes de llegar a la cámara de combustión [Boushaki, 2016], además de que evita el retroceso de la llama, conocido como *flashback*.

Este tipo de modelos para flujo no premezclado se basa en una serie de hipótesis simplificadoras que definen el estado termoquímico instantáneo del fluido como una relación con la fracción de mezcla  $f$ . Dicha fracción de mezcla se define como sigue:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,comburente}}{Z_{i,combustible} - Z_{i,comburente}} \quad \text{Eq. 2.11}$$

Donde  $Z_i$  es la fracción másica del elemento  $i$ .

La cinética química para flujos turbulentos se puede modelar mediante 3 métodos:

- PDF (Probability Density Function)
- ED (Eddy Dissipation)
- EDC (Eddy Dissipation Concept)

### 2.2.4.1. Probability Density Function (PDF)

Este modelo de combustión calcula el efecto turbulento de las llamas, el cual ignora el efecto de las fluctuaciones turbulentas y calcula las velocidades de reacción mediante las expresiones cinéticas de Arrhenius.

Una *Función de Densidad de Probabilidad (PDF)* es una función cuyo valor en cualquier punto del espacio se puede interpretar como la probabilidad de que una variable tome un valor dado. Es decir, el valor de la función PDF en dos muestras distintas puede emplearse para inducir, en un instante concreto, cuánto más probable es que una variable tome un valor comparado con el otro [Rose-Hulman, 2017].

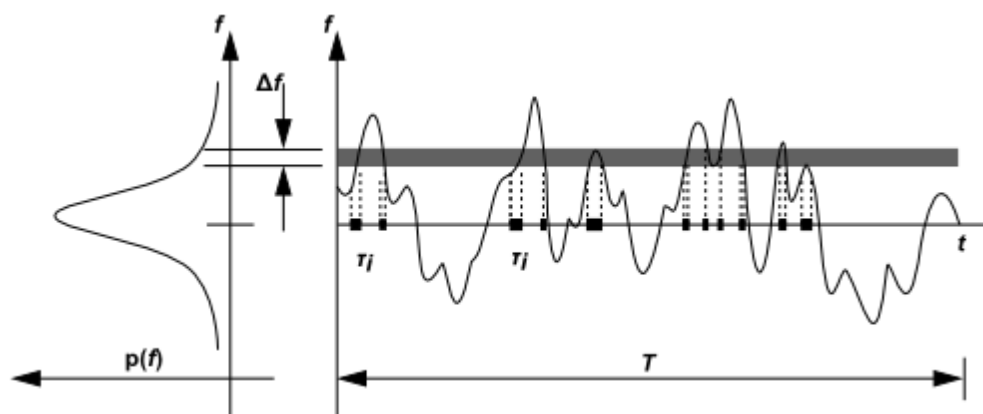


Fig. 2.4. Descripción gráfica de la función de densidad de probabilidad [Fluent, 2013]

Las ecuaciones empleadas por este modelo para la fracción másica media ( $\bar{f}$ ) y su varianza ( $\overline{f^2}$ ) en un flujo turbulento son las siguientes [Jones, 1982]:

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

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

Donde  $\sigma_t$ ,  $C_g$  y  $C_d$  son constantes.

Las ecuaciones de transporte anteriores predicen la fracción másica media y su varianza en un flujo turbulento. Estos valores, promediados respecto del tiempo, se pueden relacionar con la fracción de mezcla instantánea por medio de la *Función Densidad de Probabilidad*.

Existen multitud de formas y modelos estadísticos para la función PDF, entre las que se encuentran la función de onda rectangular, la de doble delta, distribución Gaussiana, y la función  $\beta$ . Ésta última es la más común y por ello será la elegida para resolver los modelos correspondientes de este trabajo.

Una de las ventajas de este modelo es que es capaz de predecir la formación de especies intermedias sin necesidad de conocer datos detallados de la cinética química. Además, puesto que solamente representa las especies químicas más importantes que aparecen en la reacción [Fluent, 2013], el coste computacional necesario es mucho inferior al de otros modelos.

#### 2.2.4.2. Eddy Dissipation (ED) y Eddy Dissipation Concept (EDC)

Este modelo, al contrario que el PDF, asume que las velocidades de reacción están controladas por la turbulencia. Así se consigue eliminar la gran cantidad de ecuaciones cinéticas de Arrhenius, consiguiendo un coste computacional reducido.

Este modelo requiere el uso de mecanismos de disipación de turbulencia en uno (Eddy Dissipation, ED) o dos pasos (Eddy Dissipation Concept, EDC). ED se diferencia de EDC en que este último puede incorporar los mecanismos de la cinética química y velocidades de reacción de varios pasos en flujos turbulentos, mientras que en ED todas las reacciones tienen la misma velocidad porque solamente existe un paso por reacción, de manera que no son necesarias las ecuaciones de Arrhenius. Esto supone un ahorro computacional de ED respecto a EDC.

En EDC las reacciones se supone que se producen en pequeñas escalas turbulentas, por lo que incluye mecanismos químicos detallados para los flujos turbulentos, y sí que son necesarias las ecuaciones de Arrhenius (Eq. 2.14).

$$K_j = A_j \cdot T^{\beta_j} \cdot \exp\left(\frac{E_j}{R \cdot T}\right) \quad \text{Eq. 2.14}$$

Además, la conexión entre el comportamiento de la estructura fina de las turbulencias y las características de macroescala de turbulencia (energía de la turbulencia cinética,  $k$ ; tasa de disipación,  $\varepsilon$ ) están incluidas en el concepto del EDC, en base a un modelo de cascada de energía turbulenta propuesto por [Magnussen, 2005].

El mecanismo EDC también ha demostrado ser válido para problemas de combustión con flujo premezclado (fuera del ámbito de estudio de este trabajo), donde la cinética química es más rápida que en el flujo no premezclado, ya que en estos últimos se tiene que tener en cuenta, además, el tiempo de mezclado.



El modelo que se utilizará para la resolución de algunos planteamientos estudiados en este trabajo será el EDC, puesto que, a pesar de requerir un mayor coste computacional, se ha preferido sacrificar el tiempo de computación para obtener unos resultados, a priori, más precisos.

### 2.2.5. Modelo de radiación

El modelo de radiación empleado para este trabajo ha sido el modelo *P1* (un caso particular del modelo *PN*), uno de los más sencillos y que requiere un coste computacional muy bajo.

Este modelo de radiación se basa en una aproximación de la radiación mediante armónicos esféricos. El modelo reduce los términos integrales de las ecuaciones de transferencia de radiación a términos diferenciales a través de un conjunto de ecuaciones de momentos. En el modelo general *PN*, la intensidad radiante en cada posición se expresa como una expansión en una serie de armónicos, los cuales se truncan tras un número *N* finito de términos. Para el caso particular del modelo *P1*, *N* toma el valor de 4, por lo que solamente tiene en cuenta los 4 primeros términos de la serie.

La radiación espectral incidente en la posición  $\vec{r}$  se define según la Eq. 2.15:

$$G_\lambda(\vec{r}) = \int_0^{4\pi} i_\lambda(\vec{r}, \vec{l}) \cdot d\omega \quad \text{Eq. 2.15}$$

Donde la integración tiene lugar en todos los ángulos sólidos.

El modelo de radiación *P1* produce dos ecuaciones diferenciales principales, una para el gradiente de la intensidad espectral promediada direccionalmente (Eq. 2.16) y otra para la divergencia del vector de densidad neta de flujo de calor de radiación (Eq. 2.17):

$$\vec{q}_\lambda^R = -\frac{1}{3K_\lambda} \vec{\nabla} G_\lambda = -\frac{1}{3[a_\lambda + \sigma_{s\lambda}]} \vec{\nabla} G_\lambda = -\Gamma_\lambda \vec{\nabla} G_\lambda \quad \text{Eq. 2.16}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_\lambda^R = a_\lambda [4\pi i_{\lambda b} - G_\lambda] \quad \text{Eq. 2.17}$$

Las ecuaciones Eq. 2.16 y Eq. 2.17 se combinan para dar una ecuación en derivadas parciales de segundo orden elíptica para la radiación incidente.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_\lambda^R = -\vec{\nabla} \cdot [\Gamma_\lambda \vec{\nabla} G_\lambda] = a_\lambda [4\pi i_{\lambda b} - G_\lambda] \quad \text{Eq. 2.18}$$

Esta ecuación (Eq. 2.18) no es más que un manifiesto de que el flujo de radiación neto de cualquier región es la diferencia entre el flujo emitido y el absorbido por el volumen en consideración.

## 2.3. Condiciones de contorno empleadas

En los siguientes subapartados se pretenden exponer las condiciones de contorno establecidas en Ansys Fluent® 14.5, tanto a nivel de modelos, materiales, entradas, salidas, etc., a la hora de realizar todos los cálculos que se han ejecutado para la realización del presente trabajo, con el objetivo de, en un futuro, poder ser reproducidos nuevamente.

### 2.3.1. Entrada/salida

Los parámetros de entrada y salida que se han tenido en cuenta para este trabajo son los que se exponen en la tabla 2.3.

Tabla 2.3. Parámetros de entrada y salida utilizados en el trabajo

<b>ENTRADA</b>	<p><b>Estequiometría (%en masa):</b></p> <p><b>Mezcla pobre (<math>\phi=0.8</math>): 18.7% CH<sub>4</sub>, 81.3% Aditivo</b></p> <p><b>Mezcla estequiométrica (<math>\phi=1</math>): 23.4% CH<sub>4</sub>, 76.6% Aditivo</b></p> <p><b>Mezcla rica (<math>\phi=1.2</math>): 28.1% CH<sub>4</sub>, 71.9% Aditivo</b></p>
	<p>Temperatura:</p> <p>Combustible (tobera central): 300K</p> <p>Comburente (tobera anular): 1200K</p>
	<p>Velocidad:</p> <p>Combustible (tobera central): 0.66 m/s</p> <p>Comburente (tobera anular): 1.54 m/s</p>
<b>SALIDA</b>	<p>Condición de Von Neumann</p> <p>(Presión manométrica a la salida: 0 Pa)</p>
<b>PARED</b>	Adiabática

### 2.3.2. Modelos

En la tabla 2.4 se exponen los modelos considerados a la hora de ejecutar los cálculos en Ansys Fluent® 14.5. Los valores que no se expongan en esta tabla se mantienen como predeterminados.

Tabla 2.4. Resumen de la configuración de los principales parámetros de los modelos

<b>Energía</b>	<b>Activo</b>
<b>Viscosidad</b>	<p>k-<math>\epsilon</math> RNG (Swirl Dominated Flow)</p> <p>Swirl Factor: 0.04</p> <p>Tratamiento de pared: Standard Wall Function</p>

	Modelo P1
<b>Radiación<sup>1</sup></b>	Absortion Coefficient (mixture): wsggm-domain-based
<b>Especies</b>	Species transport <sup>2</sup> Volumetric → Eddy Disipation Concept <sup>3</sup> Non premixed combustion <sup>4</sup>
<b>NO<sub>x</sub><sup>5</sup></b>	Thermal NO <sub>x</sub> → [O] Model: Partial equilibrium Prompt NO <sub>x</sub> → Equivalence Ratio: 0.76 Turbulence Interaction Mode → PDF mode: Temperature

### 2.3.3. Materiales

En cuanto a las propiedades de los materiales, se han dejado prácticamente todas ellas con los valores por defecto proporcionados en el archivo .cas del que partía el trabajo, a excepción de, en el caso de activar el modelo de radiación, el *absortion coefficient* para la mezcla se ha configurado como *wsggm-domain-based*.

Tabla 2.5. Configuración de los materiales para la resolución de los distintos modelos

Densidad	Basada en las especies químicas
Calor específico	Polinomial con la temperatura (5 coeficientes)

### 2.3.4. Algoritmos, esquemas y orden

En la tabla 2.6 se presentan los algoritmos, esquemas y ordenes tomados para la resolución de los cálculos en Ansys Fluent<sup>®</sup> 14.5:

Tabla 2.6. Algoritmos, esquemas y órdenes empleados

Pressure-Velocity Coupling	SIMPLE
Gradient	Least Squares Cell Based
Pressure	Second Order
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind

<sup>1</sup> Únicamente utilizado en los casos en los que se pretende estudiar la radiación

<sup>2</sup> Inicialmente se resuelve solamente la mezcla, y posteriormente se activa el modelo de radiación

<sup>3</sup> Solamente activo en los casos que se pretende estudiar el modelo EDC

<sup>4</sup> Solamente activo en los casos que se pretende estudiar el modelo PDF

<sup>5</sup> Solamente activo en los casos que se pretenden estudiar las emisiones de NO<sub>x</sub>

<b>Pollutant NO<sup>5</sup></b>	First Order Upwind
<b>Energy</b>	First Order Upwind
<b>Mean Mixture Fraction</b>	First Order Upwind
<b>Mixture Fraction Variance</b>	First Order Upwind

Las reacciones empleadas y los coeficientes de la (Eq. 2.13) empleados para la resolución de los modelos EDC son los que se muestran en la tabla 2.7:

*Tabla 2.7. Ecuaciones y coeficientes empleados en la resolución de los modelos EDC*

	<b>Ratio de reacción</b>	<b>A<sub>j</sub></b>	<b>β<sub>j</sub></b>	<b>E<sub>j</sub></b>
$CH_4 + 0.5 O_2 \rightarrow CO + 2 H_2$	$\omega_1 = K_1[CH_4]^{0.5}[O_2]^{1.25}$	$7.82 \cdot 10^{13}$	0	$1.254 \cdot 10^8$
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3 H_2$	$\omega_2 = K_2[CH_4]^1[H_2O]^1$	$3 \cdot 10^{11}$	0	$1.254 \cdot 10^8$
$H_2 + 0.5 O_2 \rightarrow H_2O$	$\omega_3 = K_3[H_2]^{0.25}[O_2]^{1.5}$	$1.209 \cdot 10^{18}$	-1	$1.672 \cdot 10^8$
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	$\omega_4 = K_4[CO]^1[H_2O]^1$	$2.75 \cdot 10^{12}$	0	$8.36 \cdot 10^7$

# CAPÍTULO 3.

## INFLUENCIA DE DISTINTOS MODELOS DE COMBUSTIÓN: EDDY DISSIPATION CONCEPT VS PROBABILITY DENSITY FUNCTION PARA MEZCLA ESTEQUIOMÉTRICA

---

En primer lugar, y puesto que en esta investigación se han estudiado dos modelos de combustión diferentes, se procederá a la comparación de ambos métodos, para así poder justificar la elección de uno de ellos para continuar con un estudio más detallado en los siguientes capítulos.

Los dos métodos empleados para el cálculo de la combustión para mezcla estequiométrica ( $\phi = 1$ ) son el *Eddy Dissipation Concept* (EDC) y el *Probability Density Function* (PDF).

- Con el primero de ellos parece que se obtienen unos resultados mucho más precisos y finos, pues simula toda la cinética química, aplicando para ello las ecuaciones de Arrhenius, de forma que las reacciones se producen en varios pasos y en pequeñas escalas turbulentas. Sin embargo, requiere mucha potencia de cálculo (debido al gran número de ecuaciones a resolver) y, por tanto, es muy lento. Además, dependiendo del número de reacciones que se introduzcan en el mecanismo de reacción, este es más preciso, pero requiere mayor potencia de cálculo. En el modelo estudiado se ha llegado a un compromiso entre precisión y potencia de cálculo requerida y se ha optado por elegir un mecanismo de 4 reacciones
- En cambio, el PDF genera una tabla a partir de las expresiones cinéticas de Arrhenius, utilizando para ello las especies químicas más importantes que se generan en la reacción. Puesto que una vez generada la tabla no es necesario resolver ninguna ecuación adicional (simplemente el programa consulta la tabla), es un método que requiere mucha menos potencia de cálculo y, en consecuencia, es mucho más rápido.

### 3.1. Contornos de temperatura

En primer lugar, se presentan los resultados de temperatura en el plano  $x = 0$ , plano que contiene el eje de simetría del quemador de metano.

Tal y como se puede observar en la Fig. 3.1., En el caso de EDC, se observa que las temperaturas son superiores a 1910 K, mientras que para el caso de PDF no llegan a dicha temperatura.

Además, otro aspecto que se puede ver en la imagen es el hecho de que mientras que en el caso de EDC la llama se cierra, en PDF la llama se abre y llega hasta las paredes del cilindro. El hecho de que la llama se cierre es característico de mezclas pobres, y que se abra es para mezclas ricas. En este caso la llama es difusiva, lo que demuestra que en el caso de EDC es como si no hubiese una mezcla perfecta y se comporte como pobre. Esto es así porque en el modelo EDC se tienen mucho más en cuenta las turbulencias a la hora de calcular la combustión que en el PDF.

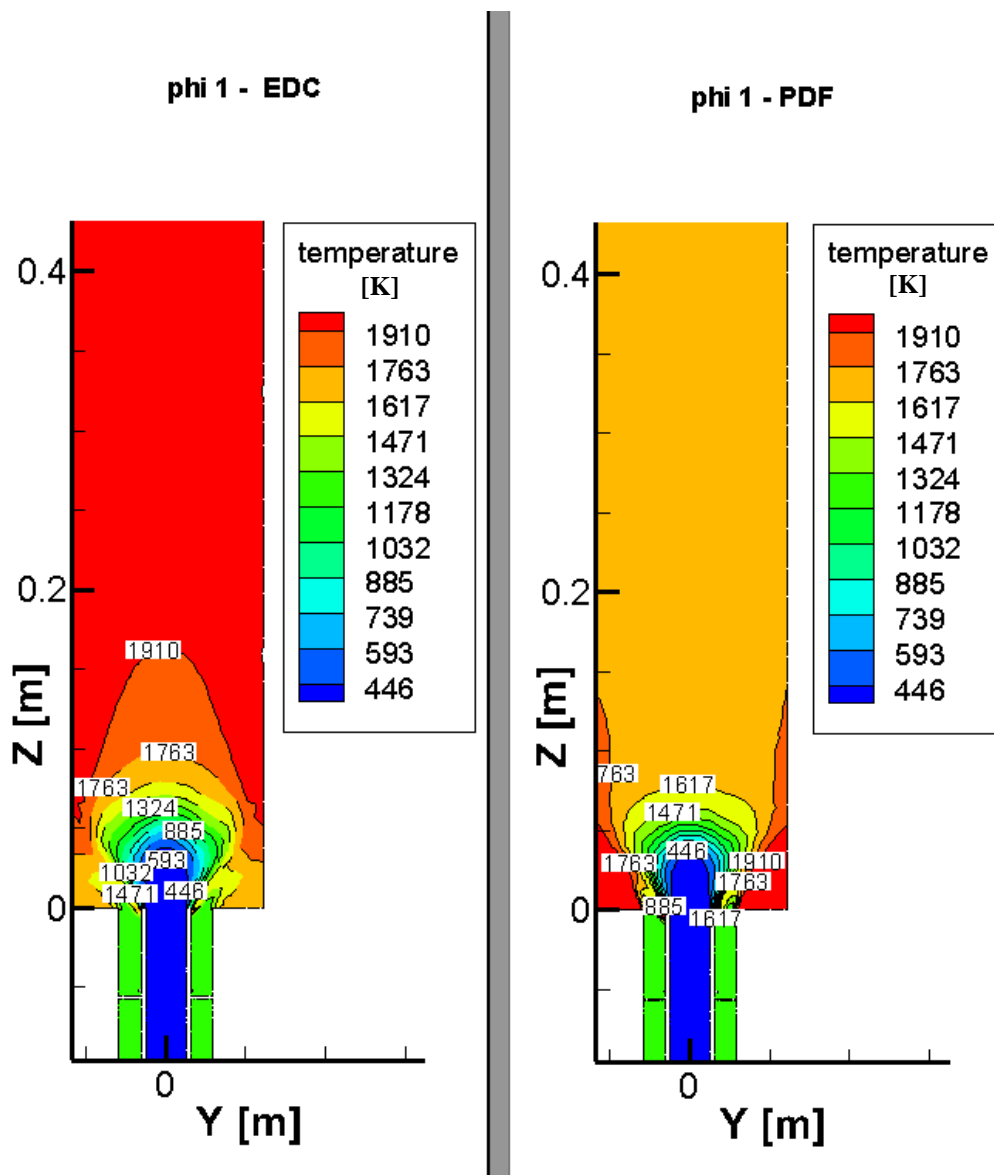


Fig. 3.1. Contornos de temperatura EDC vs PDF para  $\phi = 1$

Por otro lado, en la periferia de la cámara de combustión, el su extremo inferior, se puede ver una diferencia entre ambos modelos. En ambos se observa un aumento de temperatura (dicho fenómeno lo se explicará posteriormente con el gráfico de líneas de corriente). Sin embargo, en PDF se alcanzan temperaturas mucho más altas que en EDC (entre 1617-1763 K en EDC y superiores a 1910 K en PDF). De hecho, las máximas temperaturas del modelo PDF se encuentran en esta zona, mientras que en EDC se alcanzan más adelante en la cámara de combustión. Luego la zona de reacción predicha por el EDC está retrasada respecto a la de PDF.

Para poder apreciar mejor otro aspecto, se debe hacer zoom en la zona de la descarga de la tobera (Fig. 3.2).

En ambos modelos se observa una pequeña zona de alta temperatura justo en la zona interior de la descarga de la tobera exterior, como consecuencia de la turbulencia generada por la diferencia de velocidades de ambas toberas de descarga. Esta zona de alta temperatura implica que parte de la reacción se está llevando a cabo fuera de la cámara de combustión propiamente dicha, puesto que se introduce parcialmente en la tobera exterior. Esto, en principio, no representa una situación de peligro, puesto que la tobera exterior es la que introduce el aire, no el combustible. Si esto ocurriera

al contrario, la llama avanzaría por el interior de la tobera de descarga de combustible hacia el depósito, provocando un incendio o una explosión del mismo. Dicho fenómeno se conoce como *flashback*.

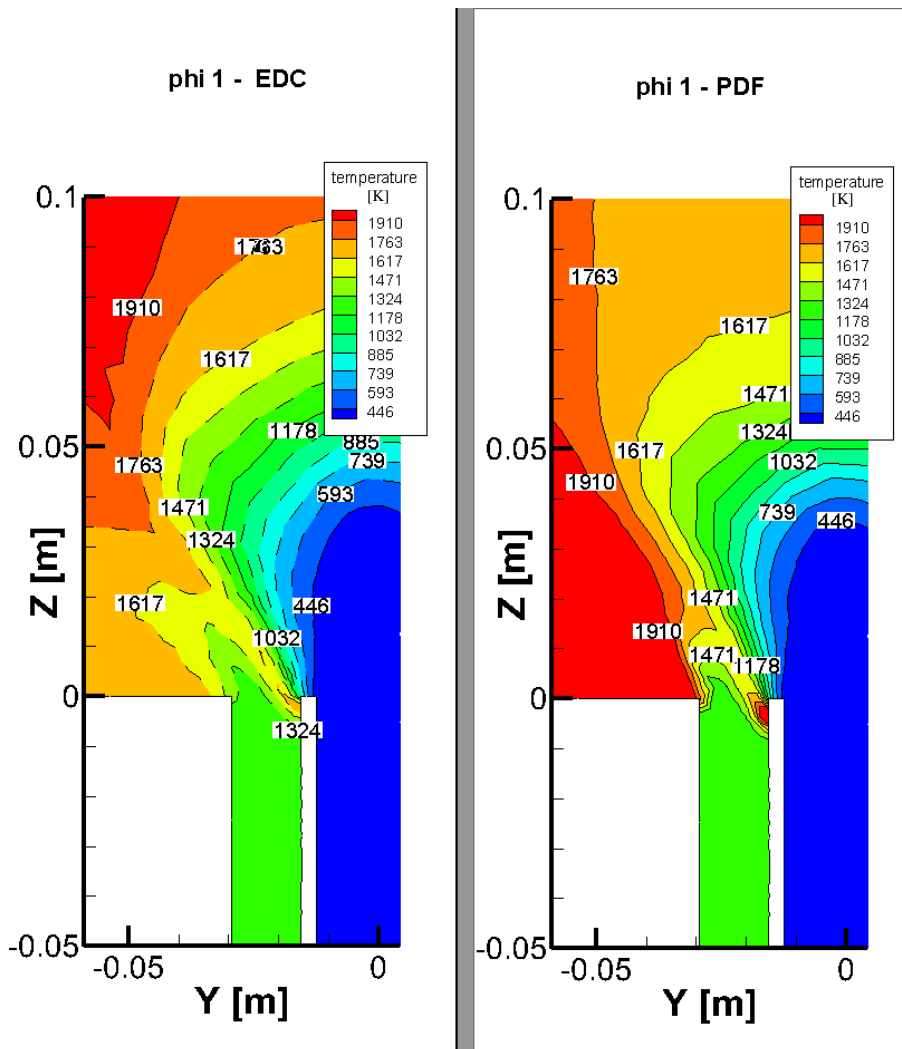


Fig. 3.2. Contornos de temperatura EDC vs PDF para  $\phi = 1$ . Detalle de la zona de descarga

En la Fig. 3.3. se puede ver claramente cómo las temperaturas alcanzadas con el método EDC son aproximadamente 300 K superiores a las alcanzadas con el método PDF.

Por otro lado, también se observa que la temperatura tarda más en estabilizarse en el caso de EDC, lo que indica que la combustión con este modelo es más lenta que con PDF. Si la temperatura aumenta, esto implica que se está liberando energía, la cual solamente puede proceder (en nuestro caso de estudio) de la reacción. Por tanto, mientras la temperatura esté aumentando, la reacción todavía no ha finalizado. Para el caso de la Fig. 3.3., mientras que la temperatura no se estabiliza hasta  $Z = 0.6$  m en EDC, con el método PDF la temperatura ya se ha estabilizado en  $Z = 0.3$  m

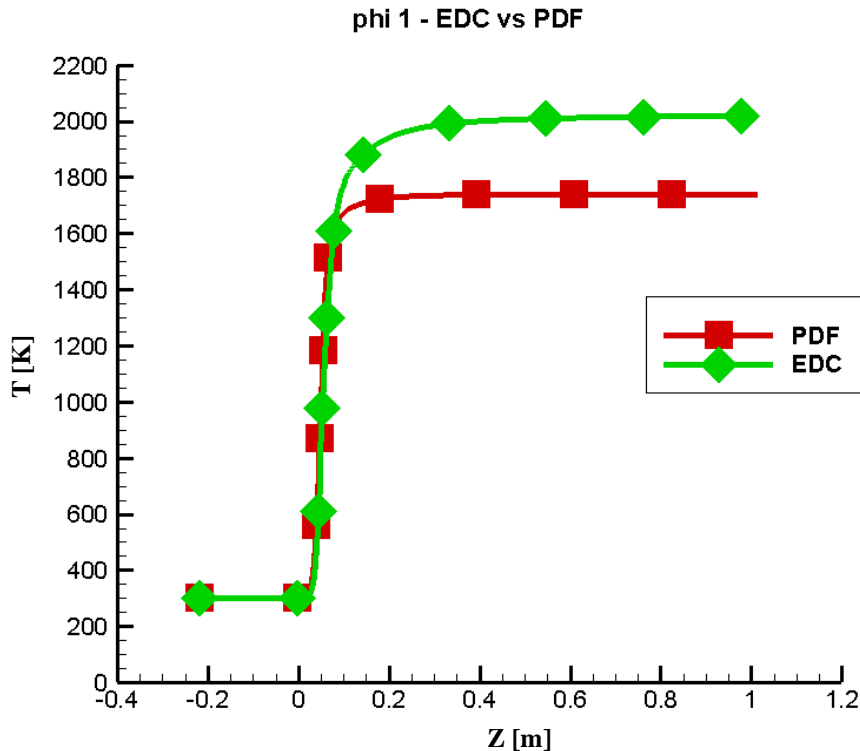


Fig. 3.3. Temperaturas a lo largo del eje Z para  $\phi = 1$ . EDC vs PDF

### 3.2. Contornos de velocidad axial y líneas de corriente

Nuevamente se utilizará el plano  $x = 0$  para representar las líneas de corriente proyectadas tangencialmente, así como los contornos de velocidad en el eje Z.

Aparentemente no se observa ninguna diferencia entre ambos modelos. Los patrones de flujo son muy similares, lo cual nos lleva a deducir que el modelo de combustión tiene muy poca influencia en los patrones de flujo.

Sin embargo, sí que se observan 2 hechos llamativos comunes en ambos modelos: la existencia de 2 zonas de recirculación bastante marcadas:

Zona de recirculación interior (IRZ: *Inner Recirculation Zone*). Como consecuencia de la componente tangencial de la velocidad. Dicha zona ayuda a mejorar la estabilidad de la llama, puesto que con el flujo reverso colabora a que la llama se mantenga cerca de las toberas de descarga y no se desplace hacia el exterior de la cámara, además de favorecer la mezcla de combustible y comburente. Además, esta recirculación ayuda a mantener una temperatura alta en el centro de la cámara de combustión, lo cual tiene 2 beneficios: mejorar el comportamiento de la combustión; y mantener la zona de altas temperaturas lejos de las paredes y así permitir el uso de materiales más baratos.

Zona de recirculación exterior (ORZ: *Outer Recirculation Zone*). Producida en las zonas de mayor esfuerzo cortante. Esta zona mejora el proceso de mezclado de combustible y comburente. Sin embargo, esto compromete la resistencia térmica de los materiales de las paredes de la cámara de combustión, ya que tienen que soportar temperaturas más altas.



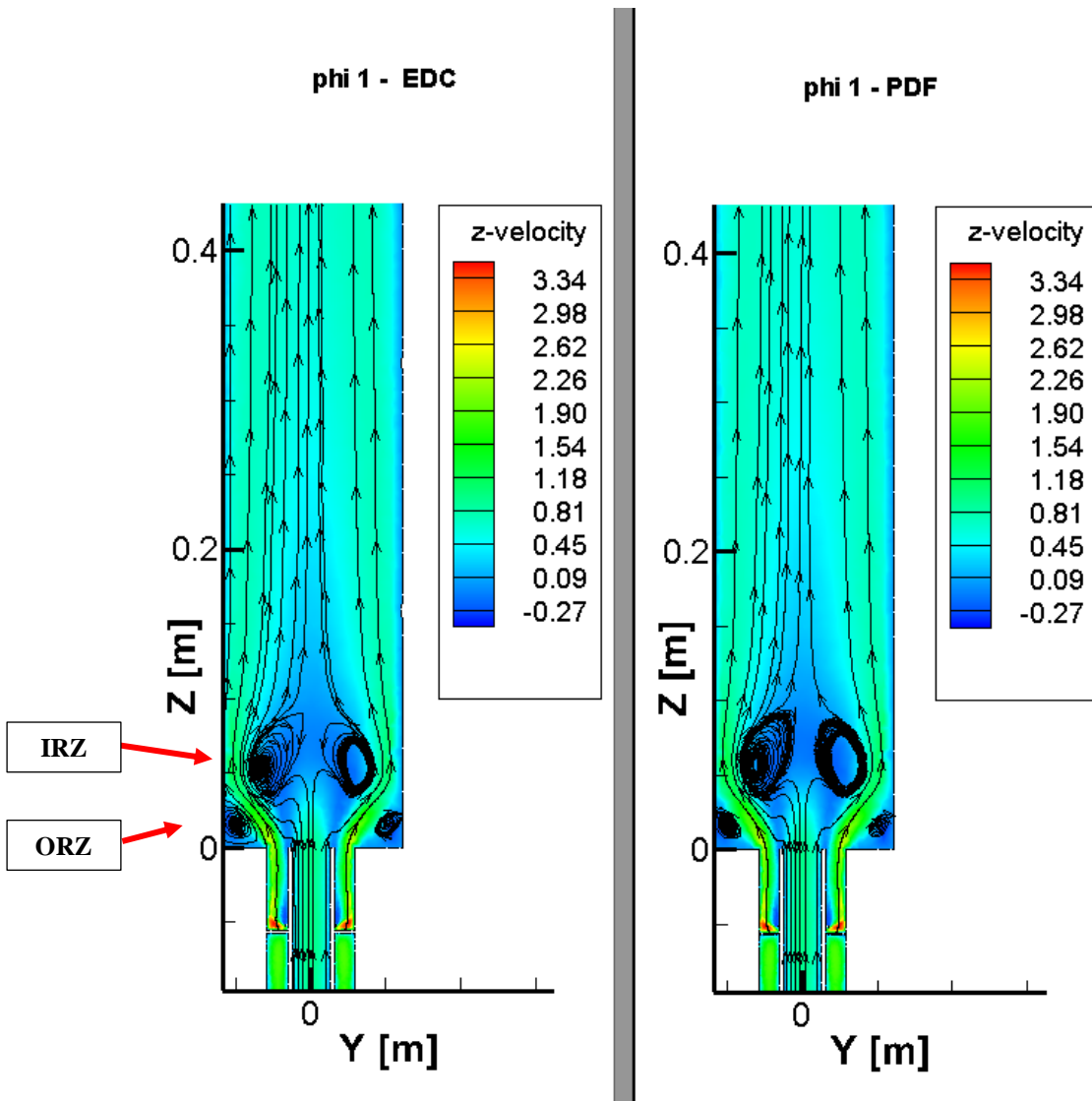


Fig. 3.4. Contornos de velocidad en el eje Z EDC vs PDF para  $\phi = 1$

En la Fig. 3.5. se pueden observar 3 aspectos:

Las velocidades son ligeramente superiores en EDC que en PDF. Esto es debido, tal y como se vio en el apartado 3.1. (véase Fig. 3.3.), a las mayores temperaturas alcanzadas en EDC.

Se observa una zona de velocidad negativa. Esta es debida a la recirculación que generan los torbellinos de la IRZ, que hacen que existan flujo reverso justo en el eje de la cámara de combustión.

Por último, cabe destacar que en las zonas de  $Z < 0$  (cuando todavía no se ha descargado el  $\text{CH}_4$  en la cámara de combustión) se produce un aumento de velocidad en el eje. La causa de esto no es otra que el desarrollo de la capa límite en la tobera interior, debido a la presencia de un flujo laminar ( $\text{Re} < 2300$ )

La condición de contorno que se impuso en la entrada de dicha tobera era una velocidad uniforme en la entrada. Por tanto, el eje y las paredes de la tobera tienen la misma velocidad. A medida que el combustible avanza por la tobera interior, se va desarrollando la capa límite, lo que implica que, mientras que los puntos próximos a las paredes se van frenando, los del centro del eje (puntos representado en la Fig. 3.5.) se van acelerando, hasta crear un perfil de velocidades parabólico, en el que, si

la capa límite estuviera completamente desarrollada, la velocidad en el centro debería ser el doble de la inicial. Esto es lo que se pretende explicar con la Fig. 3.6.

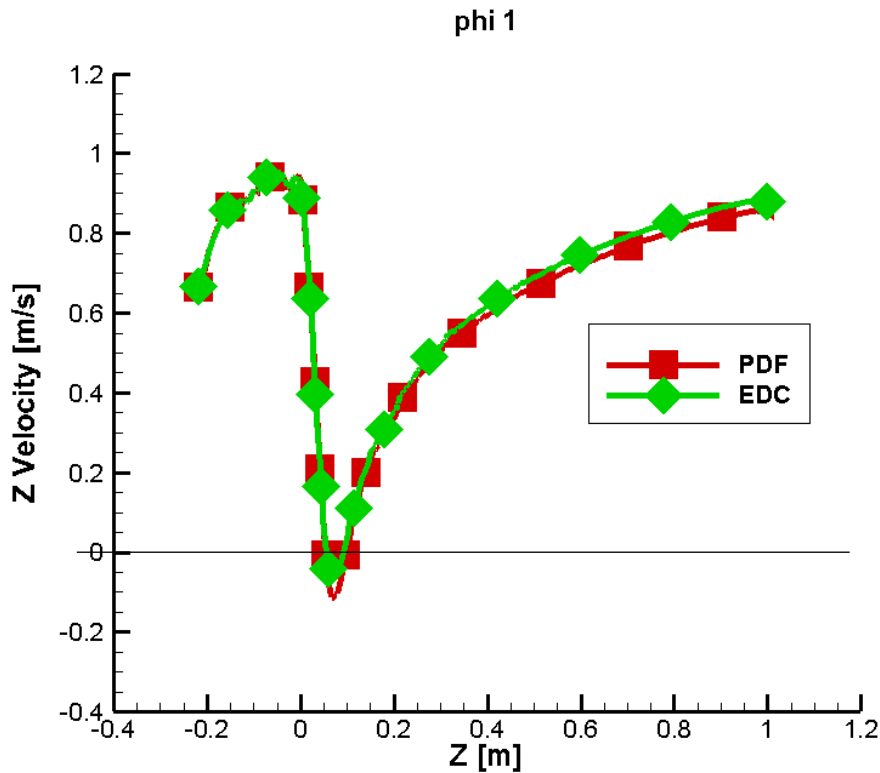


Fig. 3.5. Velocidades axiales a lo largo del eje Z. EDC vs PDF para  $\phi = 1$

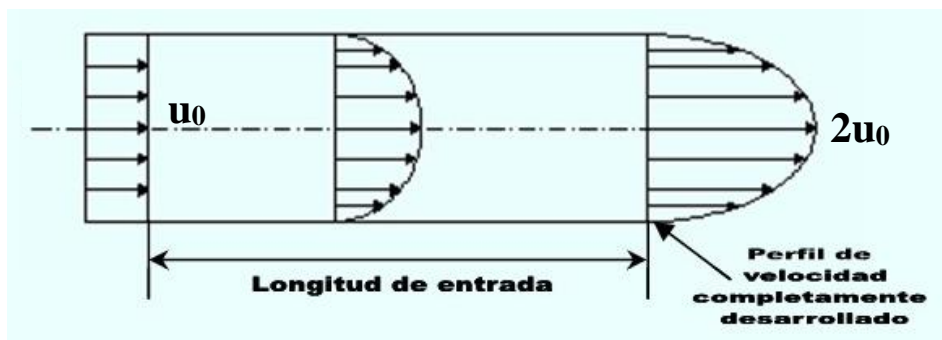


Fig. 3.6. Desarrollo del perfil de velocidades en una tobera con flujo laminar. Los perfiles no están a escala

Para comprobar si estamos en régimen laminar o turbulento, se expondrá la Fig. 3.7, con el número de Reynolds en una sección en el eje de la tobera. Tal y como se observa en dicha figura, todos los puntos de la cámara de combustión están en situación de flujo laminar ( $Re < 2300$ ). Por tanto, la Fig. 3.6. es aplicable para la cámara de combustión.

A continuación se presentan los perfiles de velocidades axiales para distintas cotas Z (posiciones axiales de la cámara de combustión), en la Fig. 3.8.

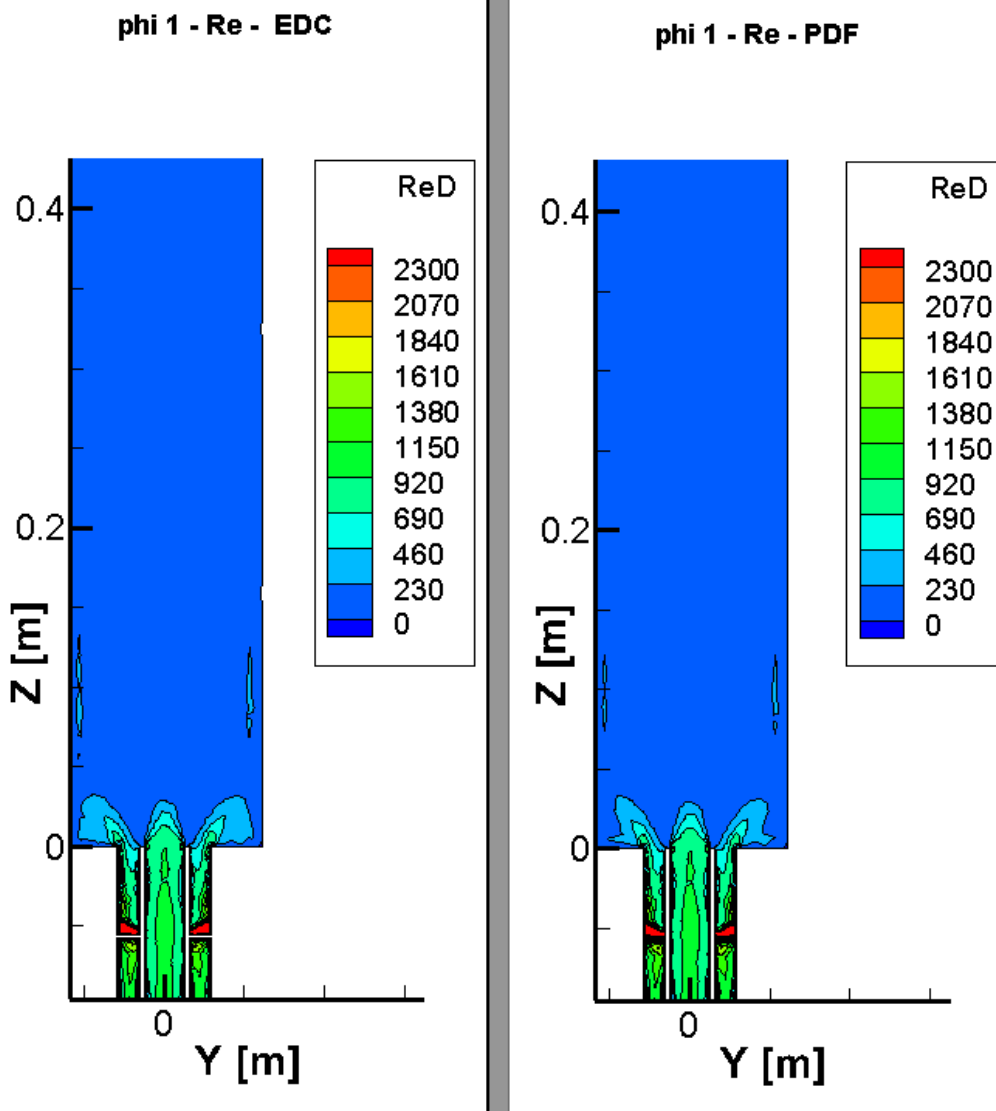
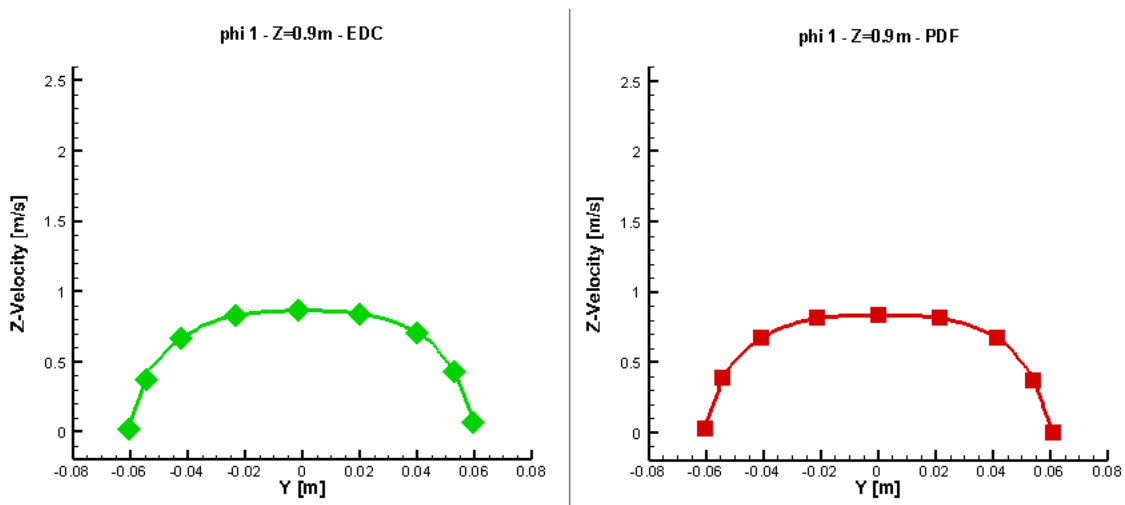
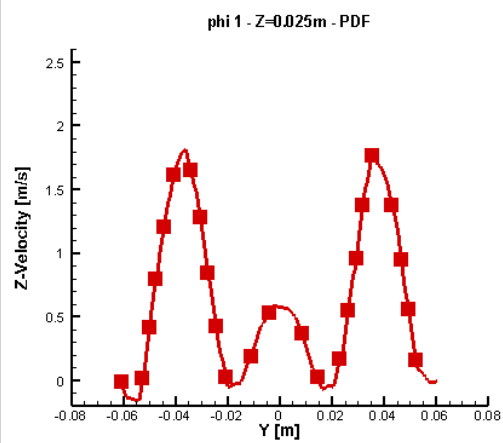
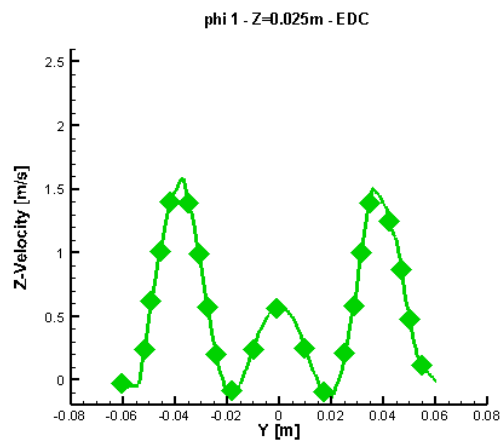
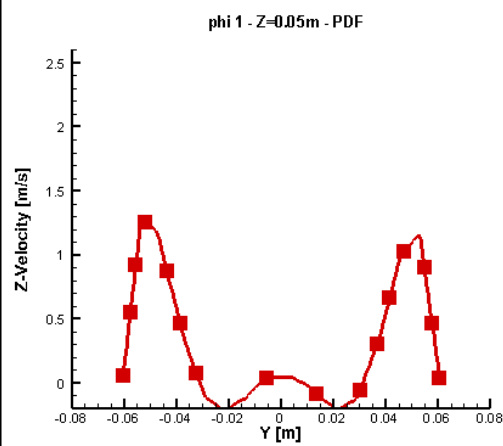
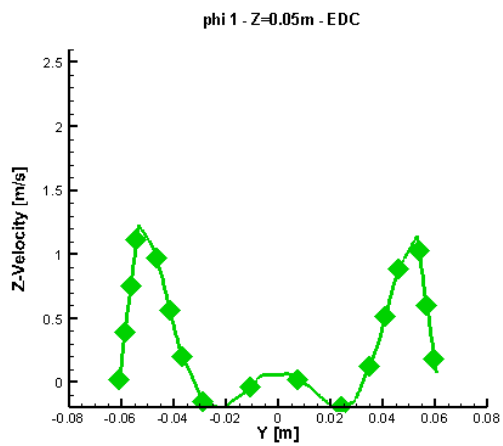
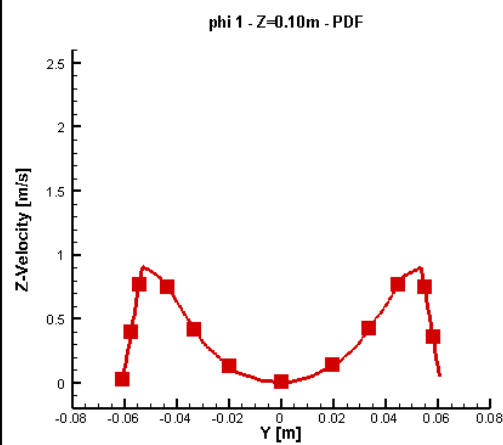
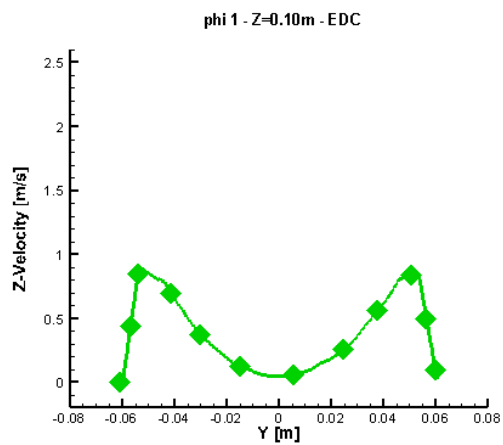
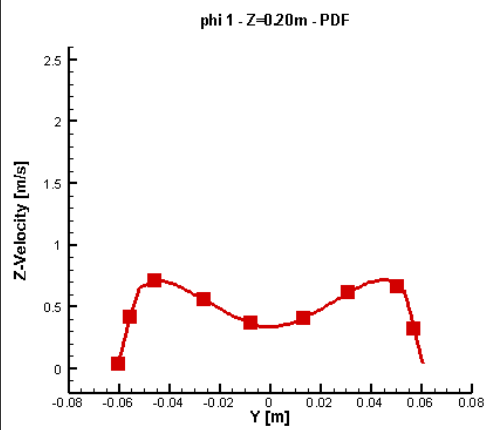
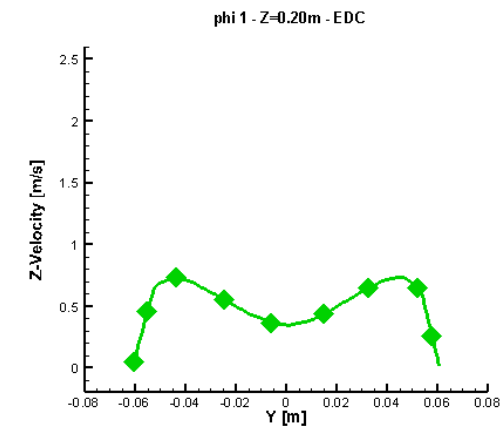


Fig. 3.7. Números de Reynolds con  $D = 0.121$  m (diámetro de la cámara de combustión) EDC vs PDF para  $\phi = 1$





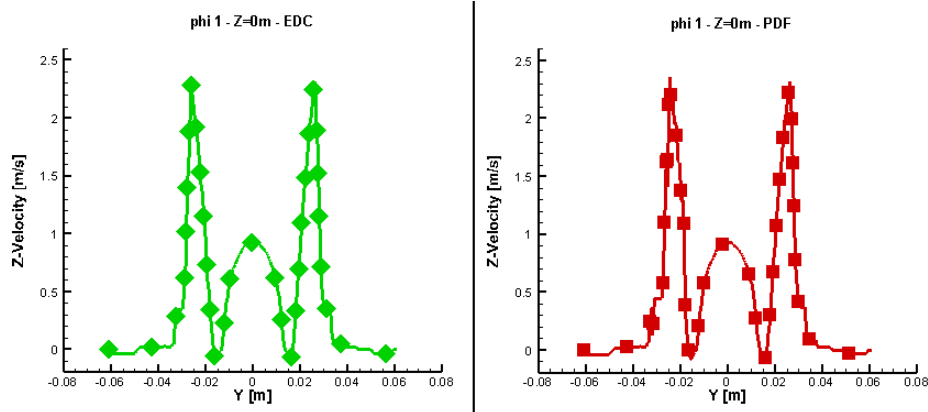


Fig. 3.8. Perfiles radiales de velocidades axiales para distintas cotas Z. EDC vs PDF para  $\phi = 1$

Observando estos perfiles de velocidades se puede ver como para  $Z = 0$  m en la descarga existe una gran diferencia de velocidades entre la tobera interior (combustible) y la exterior (comburente). Esto genera una serie de turbulencias en la pared que tienen en común ambas toberas que, tal y como se comentó en el apartado 3.1., provocan que parte del combustible se introduzca en la tobera exterior. Este perfil de velocidades confirma lo que se observó en dicho apartado con los perfiles de temperatura.

Para  $Z = 0.05$  m se puede observar que hay una amplia zona de velocidad negativa en torno a  $Y = -0.02$  m e  $Y = +0.02$  m. La causa de ello se puede ver en la Fig. 3.4., ya que en estas cotas Y se encuentra el flujo reverso generado por los torbellinos de la IRZ.

A medida que aumenta la cota Z se observa que las velocidades negativas tienden a desaparecer, y los perfiles de velocidades comienzan a adquirir la forma parabólica característica del flujo laminar en el interior de una tobera.

### 3.3. Especies químicas

En este apartado es donde se esperan obtener mayores diferencias entre ambos modelos.

En la Fig. 3.9. se observa que mientras que para EDC la fracción másica que permanece sin reaccionar es de un 0.02 de  $\text{CH}_4$ , en PDF dicha cantidad aumenta hasta 0.04, siendo en ambos casos una composición estequiométrica. Este dato se ve mejor al analizar el XY plot de fracción másica de  $\text{CH}_4$  en el eje Z.

Además, aquí se vuelve a observar, al igual que en la Fig. 3.1., el hecho de que la llama queda más confinada en EDC que en PDF.

La Fig. 3.10 muestra cómo se distribuye el  $\text{CH}_4$  en función de la temperatura en el interior del modelo.

A temperaturas bajas es donde se encuentra la mayor cantidad de  $\text{CH}_4$ , correspondiéndose a la zona de la tobera central (descarga de combustible).

A altas temperaturas prácticamente no existe  $\text{CH}_4$ . Esto se observa muy bien en la gráfica del modelo EDC, donde ha reaccionado todo el  $\text{CH}_4$  como se vio en la Fig. 3.9. Sin embargo, en la gráfica del modelo PDF, además de que se observan temperaturas superiores a las alcanzadas en el modelo EDC (correspondientes a la ORZ), se observa cómo hay una mayor cantidad de  $\text{CH}_4$  a alta temperatura (entre 1500 y 2000 K, tenemos entre  $Y(\text{CH}_4) = 0$  y  $Y(\text{CH}_4) = 0.04$ ). Esto se debe a que no

todo el CH4 reacciona y se calienta a lo largo de la cámara de combustión, como se observó en la Fig. 3.9.

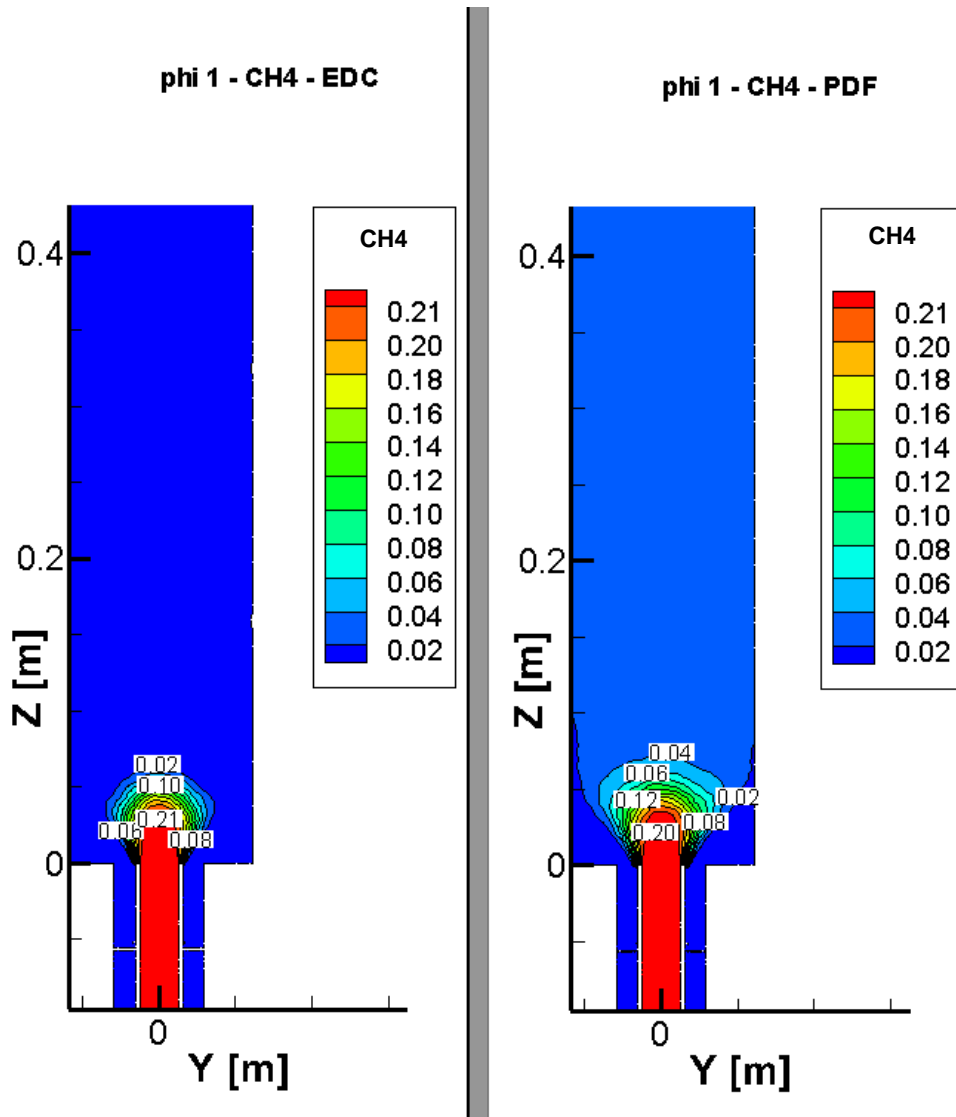


Fig. 3.9. Contornos de fracción másica de CH4, EDC vs PDF para  $\phi = 1$

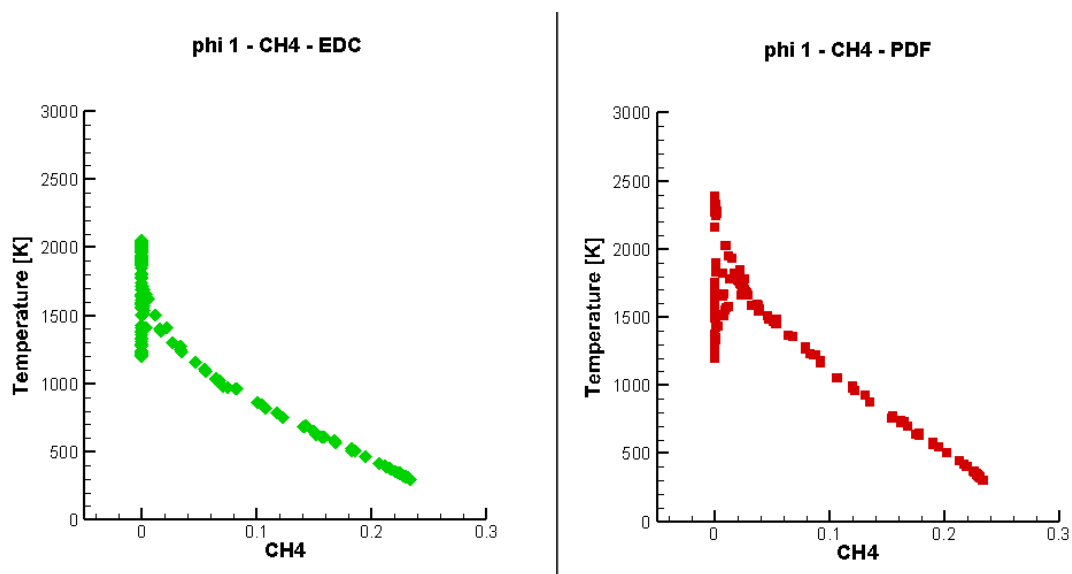


Fig. 3.10. Nube de puntos de fracción másica de CH4 frente a la temperatura, EDC vs PDF para  $\phi = 1$

Por último, entre 1200 y 1500 K se observan dos zonas claramente diferenciadas: una con fracción másica de CH<sub>4</sub> nula y otra con entre  $Y(\text{CH}_4) = 0.04$  y  $Y(\text{CH}_4) = 0.1$ . Esas dos zonas son fácilmente identificables en el modelo. La primera se corresponde con la tobera de descarga anular, por donde circula únicamente el comburente y no hay nada de CH<sub>4</sub>; y la segunda, que se corresponde con el interior de la cámara de combustión y zona donde el CH<sub>4</sub> está reaccionando.

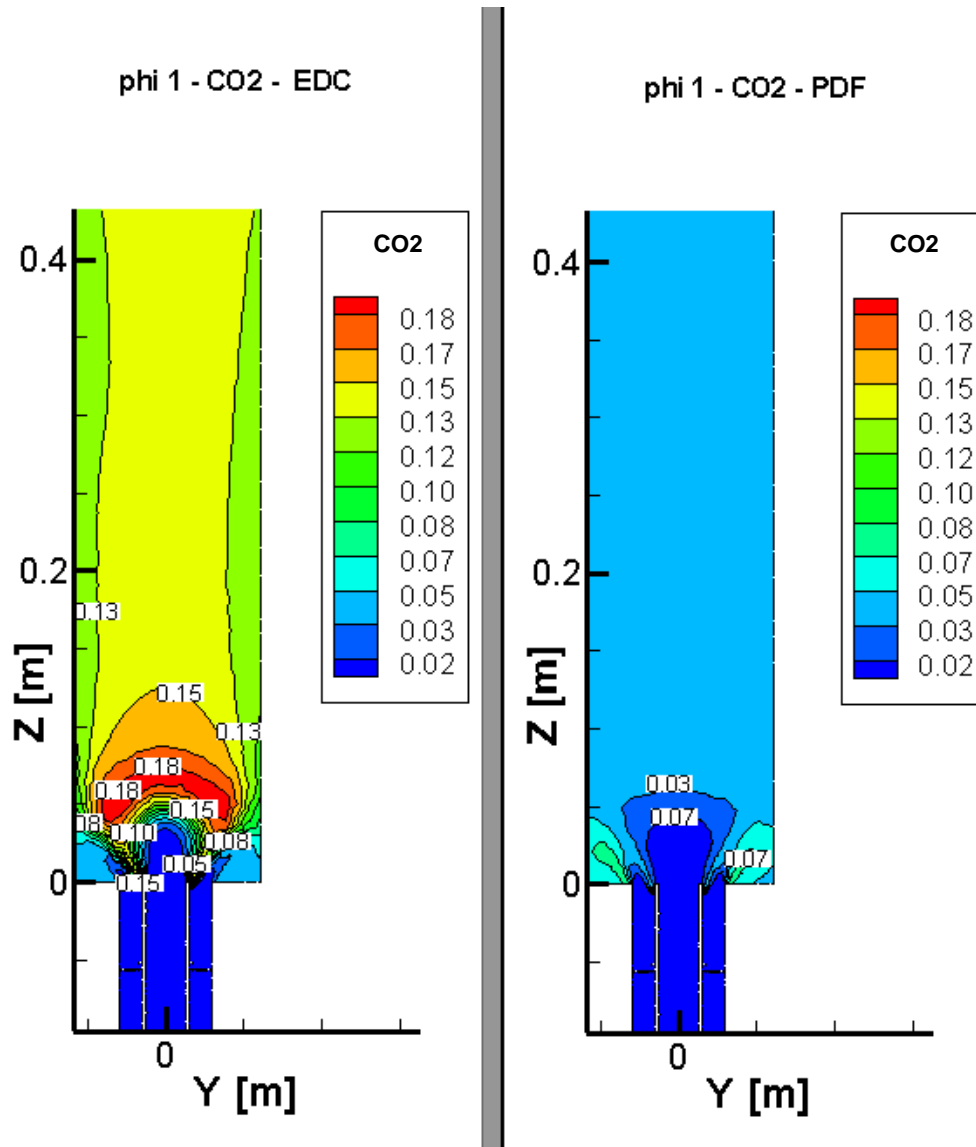


Fig. 3.11. Contornos de fracción másica de CO<sub>2</sub>, EDC vs PDF para  $\phi = 1$

Los resultados de la Fig. 3.11. eran de esperar a la vista de lo obtenido en la Fig. 3.9.: Si reacciona más CH<sub>4</sub>, como ocurre en EDC, el CO<sub>2</sub> generado será mayor, y viceversa, como ocurre en PDF.

Se observa además que en EDC hay una pequeña zona, aproximadamente en  $Z = 0.06$  m, donde la concentración de CO<sub>2</sub> es máxima, viéndose reducida a medida que aumenta la cota Z. Nuevamente, esto se verá mejor en el XY plot.

Por último, en PDF se aprecia que la máxima concentración de CO<sub>2</sub> se produce en la zona de la ORZ, de manera que esta recirculación contribuye a “retener” los gases de escape, algo que choca con lo que se observa en EDC, donde la concentración en la ORZ es más baja.

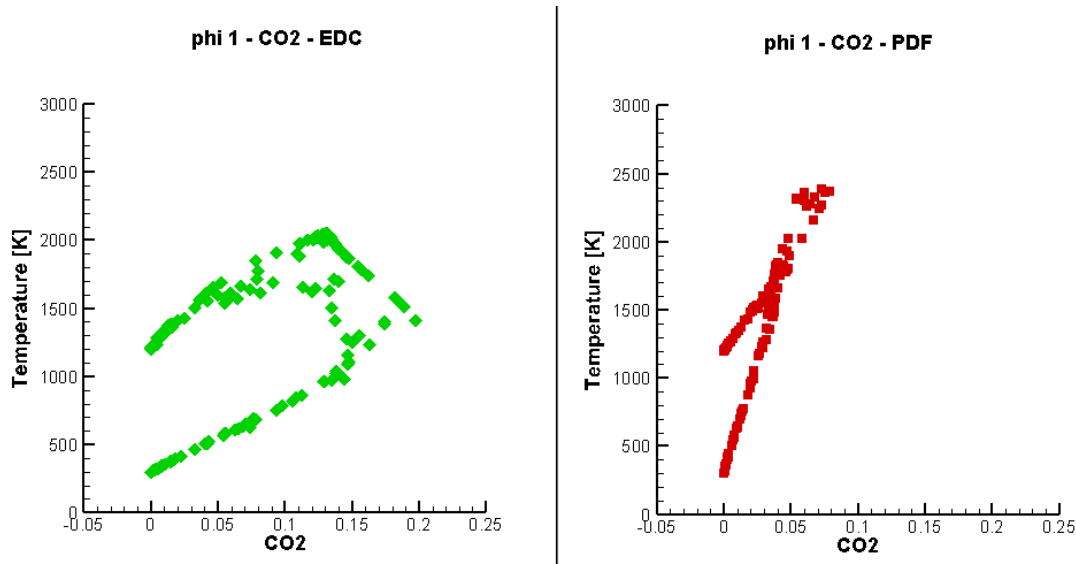


Fig. 3.12. Nube de puntos de fracción másica de CO<sub>2</sub> frente a la temperatura, EDC vs PDF para  $\phi = 1$

La Fig. 3.12 muestra cómo se distribuye el CO<sub>2</sub> en función de la temperatura en el interior del modelo.

Se ve, al igual que en la Fig. 3.11, que la fracción másica de CO<sub>2</sub> es menor en el modelo PDF que en el EDC, así como las temperaturas, mayores en el modelo PDF. Además, se pueden distinguir dos zonas: la zona con fracción másica de CO<sub>2</sub> nula a 300 K, correspondiente a la tobera central, por donde circula el combustible (todavía sin reaccionar ni generar CO<sub>2</sub>); y la zona con fracción másica de CO<sub>2</sub> nula y 1200K, correspondiente a la tobera anular, por donde circula el comburente, libre de CO<sub>2</sub>. Estas dos zonas van aumentando progresivamente su fracción másica de CO<sub>2</sub> y su temperatura, coincidiendo con la combustión de los distintos componentes de la mezcla.

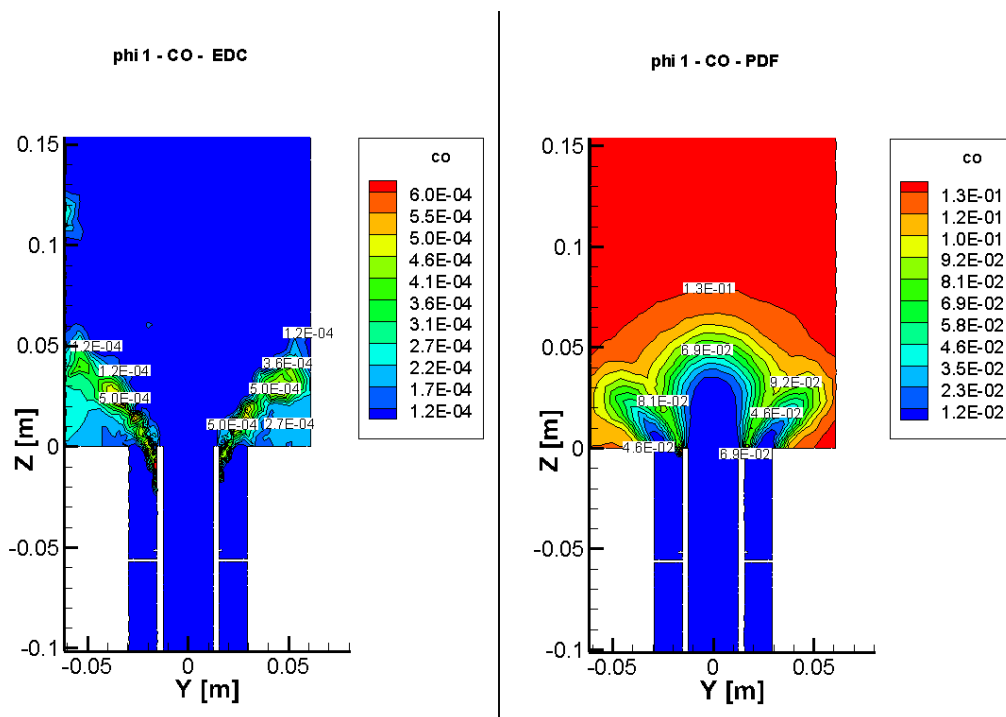


Fig. 3.13. Contornos de fracción másica de CO, EDC vs PDF para  $\phi = 1$ .  
Las escalas no son las mismas en EDC y en PDF



Otra causa de la formación de tanto CO<sub>2</sub> en EDC y tan poco en PDF se puede ver observando los contornos de CO (Fig. 3.13 – Nótese que la escala no es la misma en EDC que en PDF). En EDC la cantidad de CO que existe es muy baja (del orden de 10<sup>-4</sup>) y, además, únicamente se encuentra en la zona más próxima a la descarga, donde se produce la reacción. Esto indica que, para el mecanismo de reacción elegido para EDC (de 4 reacciones), todo el CO es un producto intermedio de la reacción, no es un producto final. Por tanto, podemos decir que a la salida del quemador todo el CO ha desaparecido, transformándose en CO<sub>2</sub>.

En cambio, en el modelo PDF la combustión es incompleta y permanece cierta cantidad de CO que no reacciona y, por tanto, no se transforma en CO<sub>2</sub>.

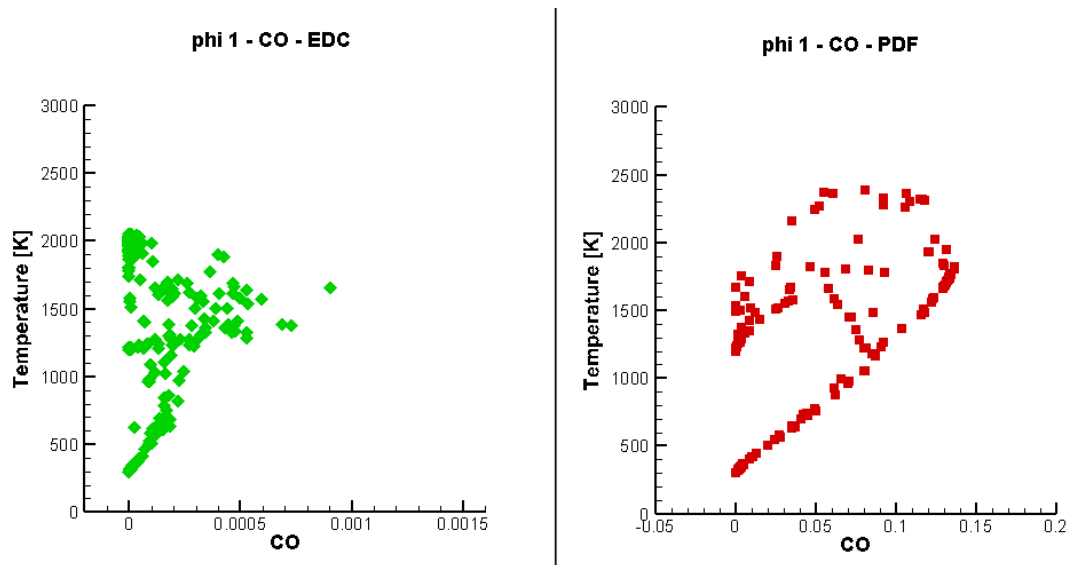


Fig. 3.14. Nube de puntos de fracción másica de CO frente a la temperatura, EDC vs PDF para  $\phi = 1$  Las escalas no son las mismas en EDC y en PDF

La Fig. 3.14 muestra cómo se distribuye el CO en función de la temperatura en el interior del modelo.

Nuevamente se observa aquí que el CO generado en el modelo EDC es prácticamente nulo (nótese que las escalas son distintas en ambas gráficas), como se vio en la Fig. 3.13. En dicha figura se pueden distinguir las mismas zonas que se comentaron en la Fig. 3.12. En la gráfica del modelo PDF se aprecian claramente, mientras que en la de CO es más difícil observarlas, debido a la baja concentración de CO que existe cerca de la descarga, y a su posterior desaparición al reaccionar y transformarse en CO<sub>2</sub>.

### 3.4. Selección del modelo

Para trabajar en los siguientes capítulos se deberá elegir uno de los dos modelos presentados en este capítulo 3, teniendo como base los resultados anteriormente expuestos.

El modelo seleccionado será el PDF debido a los siguientes motivos:

- Este modelo minorra la temperatura a la salida de la cámara de combustión y la aumenta en la ORZ, lo que genera una zona crítica de cara a la resistencia térmica de los materiales empleados en la construcción de la cámara de combustión.

- La ORZ tiene un tamaño inferior en el modelo PDF que en EDC, aunque los perfiles radiales de velocidades axiales son similares.
- En el modelo PDF se genera una menor cantidad de CO<sub>2</sub> que en el modelo EDC. Sin embargo, no se consume todo el CH<sub>4</sub>, algo que sí ocurre en el modelo EDC. También se genera más CO en el modelo PDF, algo que no ocurre en el modelo EDC por el mecanismo de 4 reacciones que se ha empleado.

# CAPÍTULO 4.

## INFLUENCIA DE LA RADIACIÓN PARA DISTINTAS ESTEQUIOMETRÍAS

---

El estudio de la radiación implica la adición de una serie de ecuaciones adicionales que el programa de cálculo deberá resolver para proporcionar unos resultados fiables. Esto implica que el tiempo de ejecución de cada iteración será mayor. Por tanto, el objetivo de este capítulo es comprobar si existen diferencias notables entre utilizar un modelo de radiación o no utilizarlo, de cara a tener razones de peso para poder omitir el cálculo de la radiación para futuros estudios.

La motivación para añadir el estudio de la radiación radica en el hecho de que un cuerpo, por el simple hecho de estar a una temperatura superior al cero absoluto, emite radiación. Es más, según la ley de Stefan-Boltzmann, la emisión de radiación de un cuerpo negro depende de la temperatura elevada a la cuarta potencia. Puesto que, tal y como se vio en el capítulo 3, las temperaturas máximas alcanzadas en este quemador son del orden de 1900 K, se ha considerado que la radiación puede influir en gran medida a los resultados, aumentando o disminuyendo las temperaturas máximas alcanzadas o incluso llegando a variar el contorno de temperaturas del modelo. El hecho de variar la distribución de temperaturas, afectara también a las velocidades axiales que se alcancen en la cámara de combustión y a los patrones de flujo.

El modelo del que se ha partido para realizar estos cálculos ha sido el modelo de reacción PDF, para distintas estequiometrías (pobre  $\phi=0.8$ , estequiométrica  $\phi=1$  y rica  $\phi=1.2$ ). Dentro del software Ansys Fluent® 14.5 existen multitud de modelos de radiación, sin embargo, el que se ha elegido para realizar este estudio ha sido el modelo P1: un modelo bastante sencillo y que requiere un coste computacional menor que otros modelos, puesto que implica añadir solamente 2 ecuaciones adicionales a resolver (ver capítulo 2.2.5). El objetivo es sentar una base para, en futuros trabajos, profundizar más en este tema.

El fenómeno de radiación ha sido estudiado también por autores como [Kim, 2016], [Centeno, 2016] o [Shaddix, 2017]. A pesar de ello, su estudio no coincide ni en geometría ni en parámetros de flujo con el estudiado en este trabajo, por lo que no se compararán sus resultados con los obtenidos en este estudio.

### 4.1. Contornos de temperatura

El principal parámetro que se ve afectado como causa de activar la radiación es la temperatura. Las Fig. 4.1, 4.2 y 4.3 muestran los contornos de temperatura para distintas estequiometrías, comparando los resultados con el modelo de radiación activado o desactivado.

Como se observa en las Fig. 4.1, 4.2 y 4.3 las diferencias son más que notables en términos de temperatura. Las temperaturas alcanzadas son menores activando el modelo de radiación, especialmente en las zonas cercanas a las paredes de la cámara de combustión. Esto puede deberse a que el coeficiente de absorción ( $\kappa_v$ ) configurado en este estudio para la mezcla de aire-metano ha sido *WSGGM basado en el dominio*, lo que nos proporciona un valor calculado de coeficiente de absorción de en torno a  $0.01 \text{ m}^{-1}$ . Por tanto, este deberá ser uno de los principales parámetros a revisar para futuros estudios.

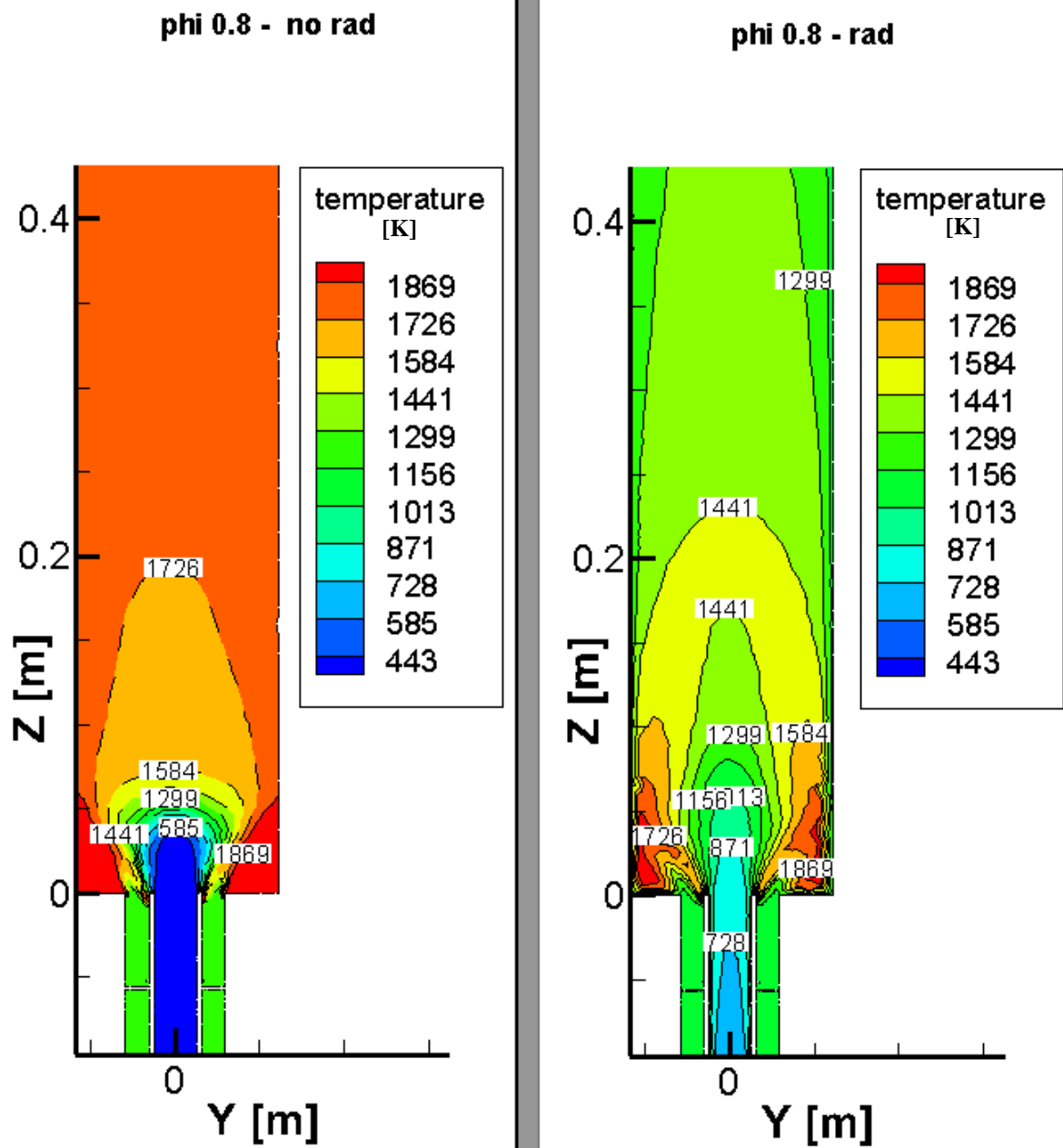


Fig. 4.1. Contornos de temperatura (Rad vs No Rad) para  $\phi = 0.8$

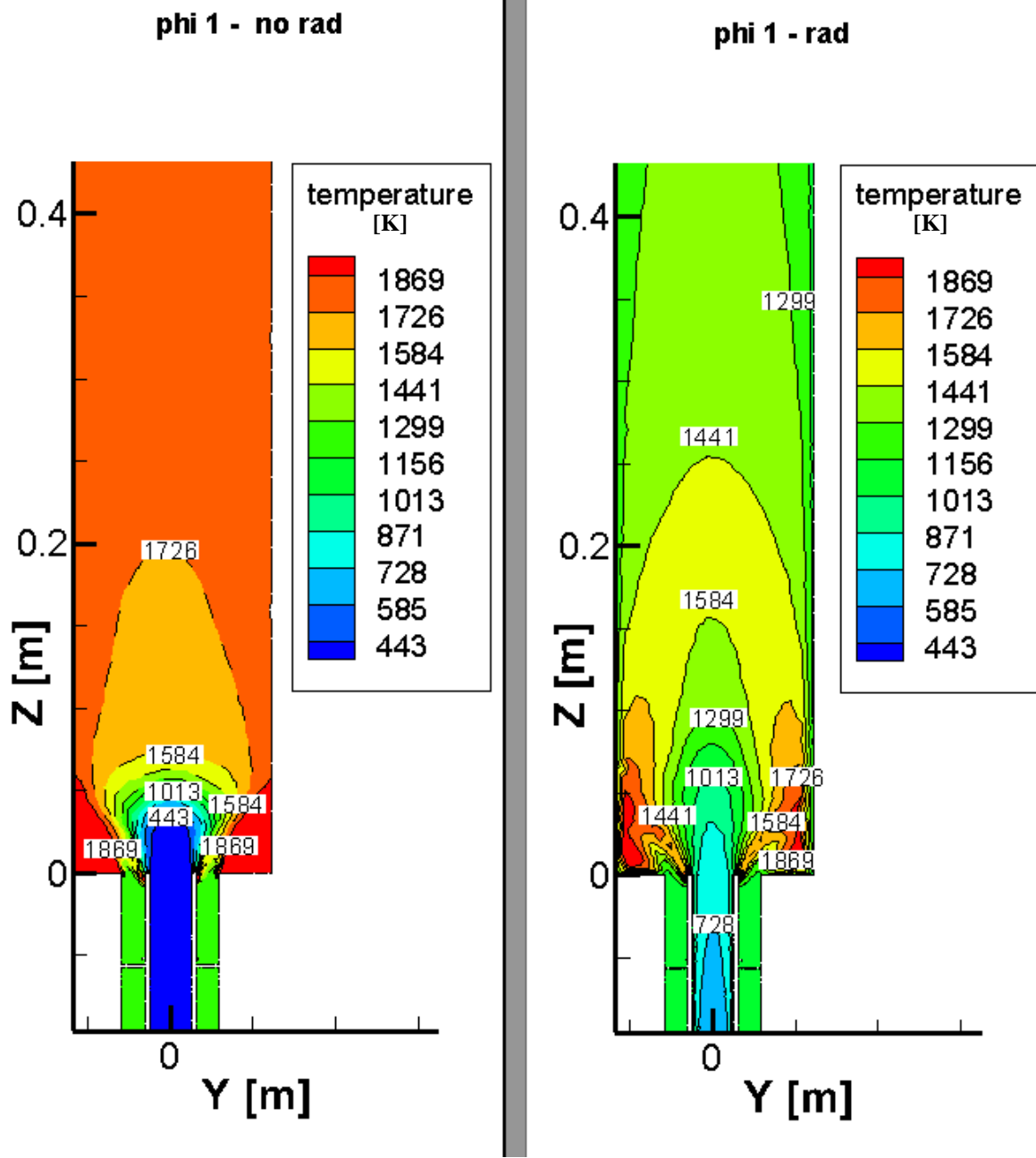


Fig. 4.2. Contornos de temperatura (Rad vs No Rad) para  $\phi = 1$

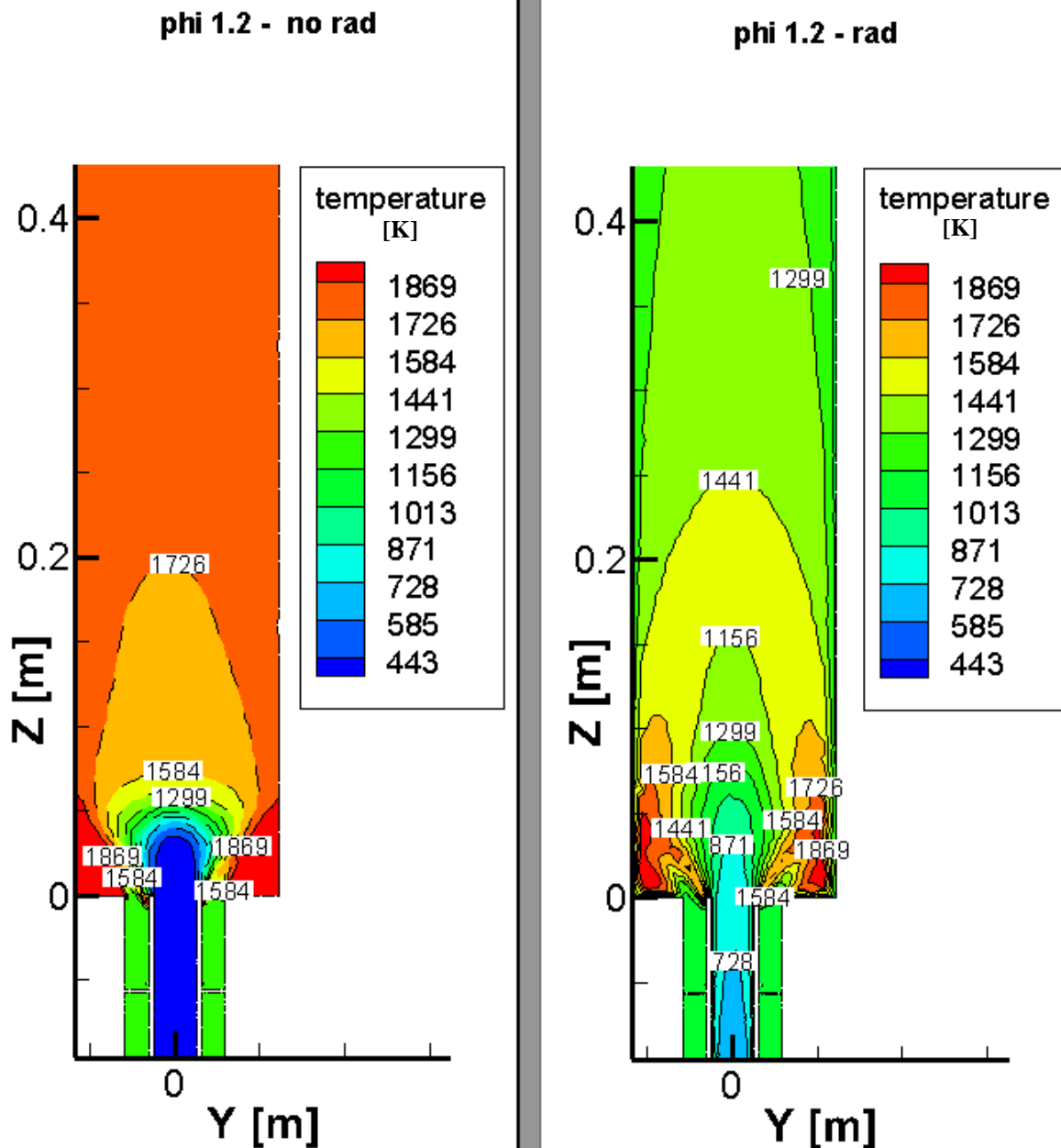


Fig. 4.3. Contornos de temperatura (Rad vs No Rad) para  $\phi = 1.2$

Además, activando el modelo de radiación la llama es mucho más alargada y estrecha, tiende a cerrarse. Algo similar también se pudo observar en el capítulo anterior, en la Fig. 3.1. En aquel caso se vio cómo en EDC la llama también se cerraba.

En ambos casos también se observa que existe una pequeña zona en la que la temperatura aumenta hacia dentro de la tobera exterior. Se trata del fenómeno del flashback, que ya se explicó en el capítulo 3.

Si se comparan los contornos de temperatura entre las distintas estequiometrías estudiadas ( $\phi$  0.8, 1 y 1.2, vemos que las diferencias entre ellas apenas son notables.

Observando la tobera interior, por la que se descarga el combustible, se puede observar que, en el caso de radiación, la temperatura varía a lo largo de dicha tobera, antes de llegar a la cámara de combustión. Por el contrario, si no hay radiación dicha

temperatura permanece constante hasta la cámara de combustión. A continuación se realizará un zoom en la zona de la descarga para observar mejor este fenómeno y poder explicarlo.

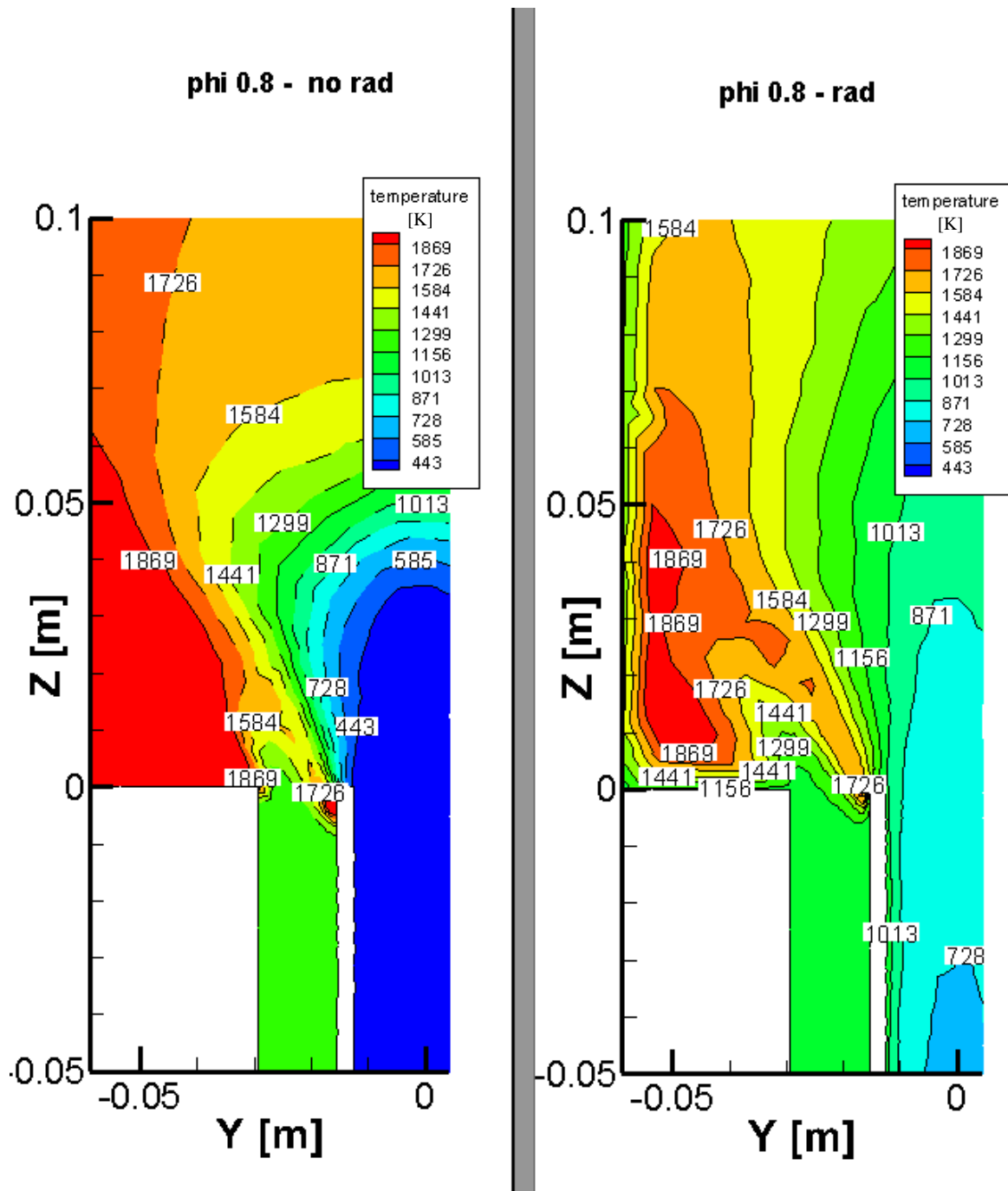


Fig. 4.4. Detalle de los contornos de temperatura (Rad vs No Rad) para  $\phi = 0.8$

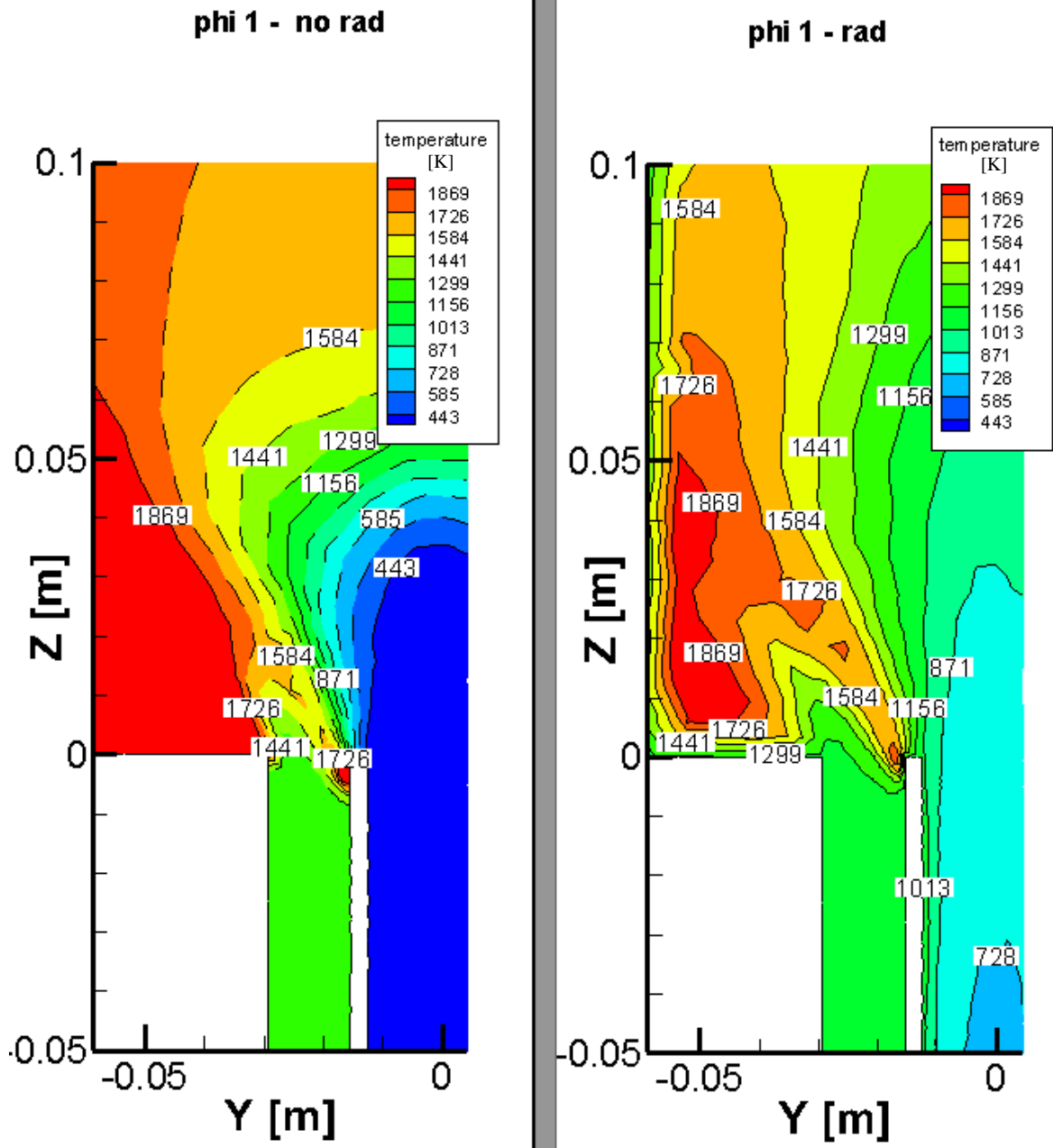


Fig. 4.5. Detalle de los contornos de temperatura (Rad vs No Rad) para  $\phi = 1$



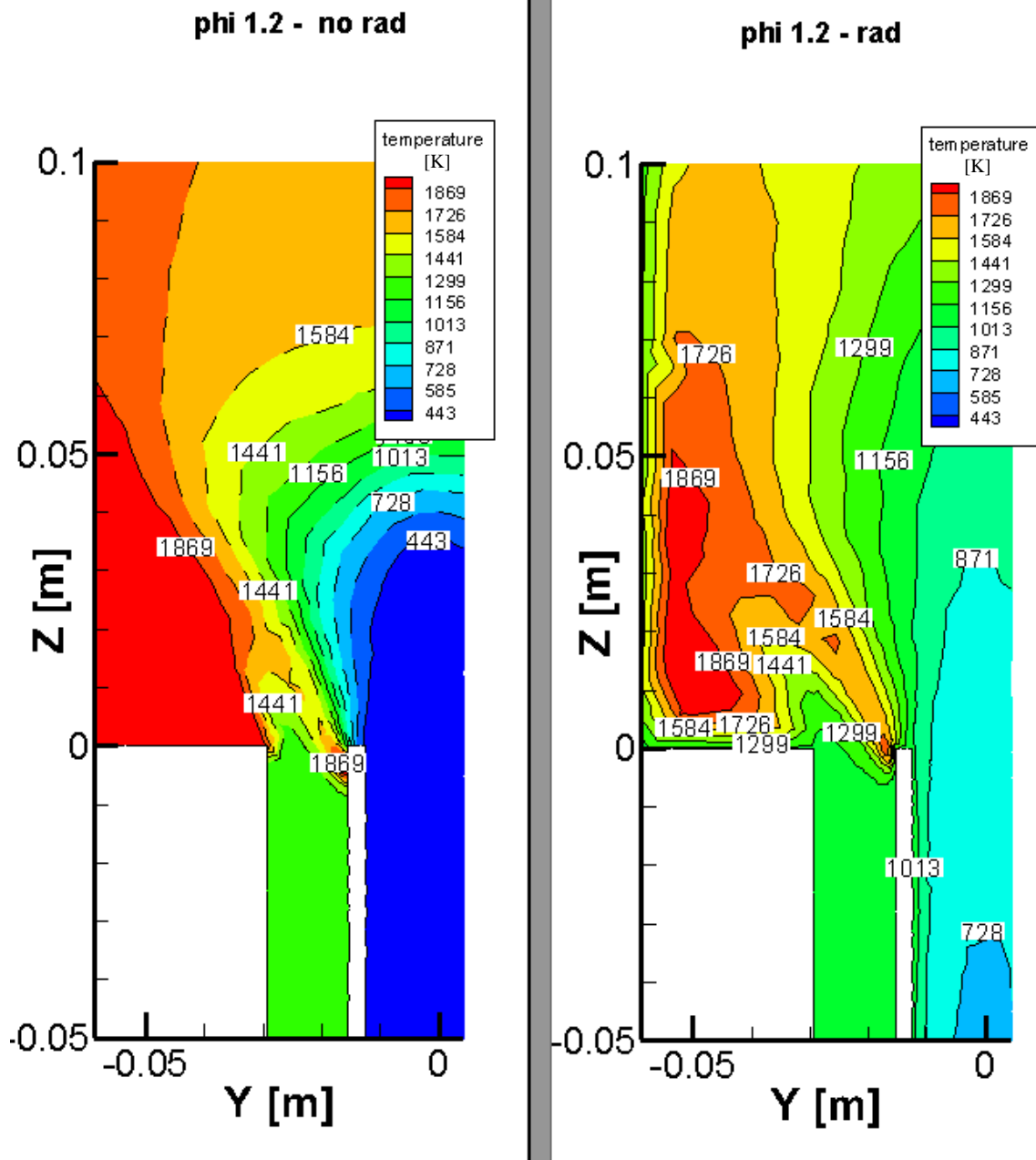


Fig. 4.6. Detalle de los contornos de temperatura (Rad vs No Rad) para  $\phi = 1.2$

Observando estos detalles de las Fig. 4.4, 4.5 y 4.6, se ve que en la tobera interior de los casos con radiación aumenta la temperatura a medida que el combustible recorre dicha tobera. Esto se debe a que por la tobera exterior circula el comburente a una temperatura superior y cede parte de ese calor, a la pared que hay entre ambas toberas. Por radiación, dicho calor se transmite al combustible que circula por la tobera interior.

Asimismo, también se puede ver con mayor detalle que, en el caso de radiación, las paredes de la cámara de combustión se mantienen a una temperatura inferior a la del interior de la propia cámara de combustión.

Otro hecho que se observa en todos los casos es el fenómeno del flashback, es decir, la extensión de la reacción hacia el interior de la tobera exterior, la del comburente, como consecuencia de las turbulencias generada cuando los dos flujos (combustible y comburente), a distinta velocidad, entran en la cámara de combustión.

Por último, se observan diferencias en la distribución de temperaturas en la ORZ de los casos con y sin radiación.

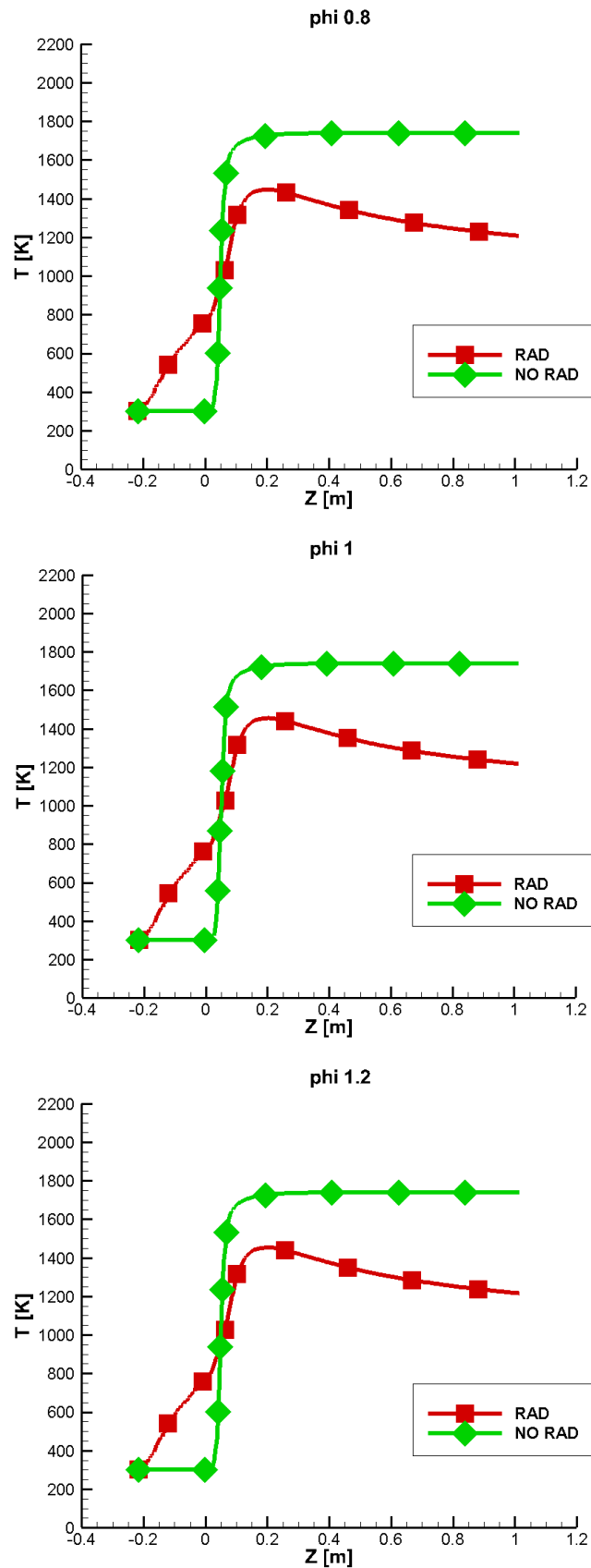


Fig. 4.7. Temperaturas a lo largo del eje  $Z$  para  $\phi = 0.8$ ,  $\phi = 1$  y  $\phi = 1.2$ . Rad vs no rad

En la Fig. 4.7 se puede apreciar claramente las diferencias entre aplicar el modelo de radiación y no aplicarlo. Se observa lo que se ha comentado anteriormente:

- En el caso de radiación, para cotas del eje Z negativas (dentro de la tobera interior) la temperatura aumenta progresivamente.
- Una vez que combustible y comburente entran en contacto, la temperatura aumenta en mayor medida (como consecuencia de la reacción). Dicho gradiente de temperatura es más pronunciado en el caso de no aplicar radiación.
- La máxima temperatura alcanzada en el eje es superior si no se aplica radiación.
- En el caso de radiación, la temperatura en el eje va disminuyendo a medida que aumenta la distancia recorrida. En cambio, si no se aplica radiación dicha temperatura permanece constante.
- No hay diferencias apreciables entre distintas estequiometrías.

## 4.2. Contornos de velocidad axial y líneas de corriente

Ya se ha visto que la distribución de temperaturas ha cambiado sustancialmente aplicando radiación y no aplicándola. A continuación se verá si este cambio de temperatura afecta a las velocidades y a las líneas de corriente.

Al igual que ocurrió con los contornos de temperatura, nuevamente se vuelven a apreciar diferencias entre aplicar el modelo de radiación o no aplicarlo. Sin embargo, en este caso las diferencias no son tan grandes como anteriormente.

En cuando a la ORZ, no hay una diferencia significativa entre ambos modelos.

Si se observa la IRZ, se puede apreciar que los torbellinos que se generan son de unas dimensiones ligeramente más pequeñas en el caso de radiación respecto al de no radiación. Además, también se puede ver que sin radiación la IRZ tiene forma de bulbo, con velocidades negativas en el eje de la cámara de combustión. En cambio, con radiación la IRZ tiene forma de anillo, con velocidades positivas en todo el eje de la cámara de combustión (ver Fig. 4.11). Ello es consecuencia directa del aumento de la temperatura en la descarga de la tobera central.

En cuando a la magnitud de la velocidad, viendo estas figuras no podemos decir nada, por la falta de precisión al utilizar una escala de colores, aunque sí que se observa un ligero aumento de velocidad en torno al eje de la tobera central. Esto se explicará más detalladamente con la Fig. 4.11.

Nuevamente, no se observa diferencias entre distintas estequiometrías.

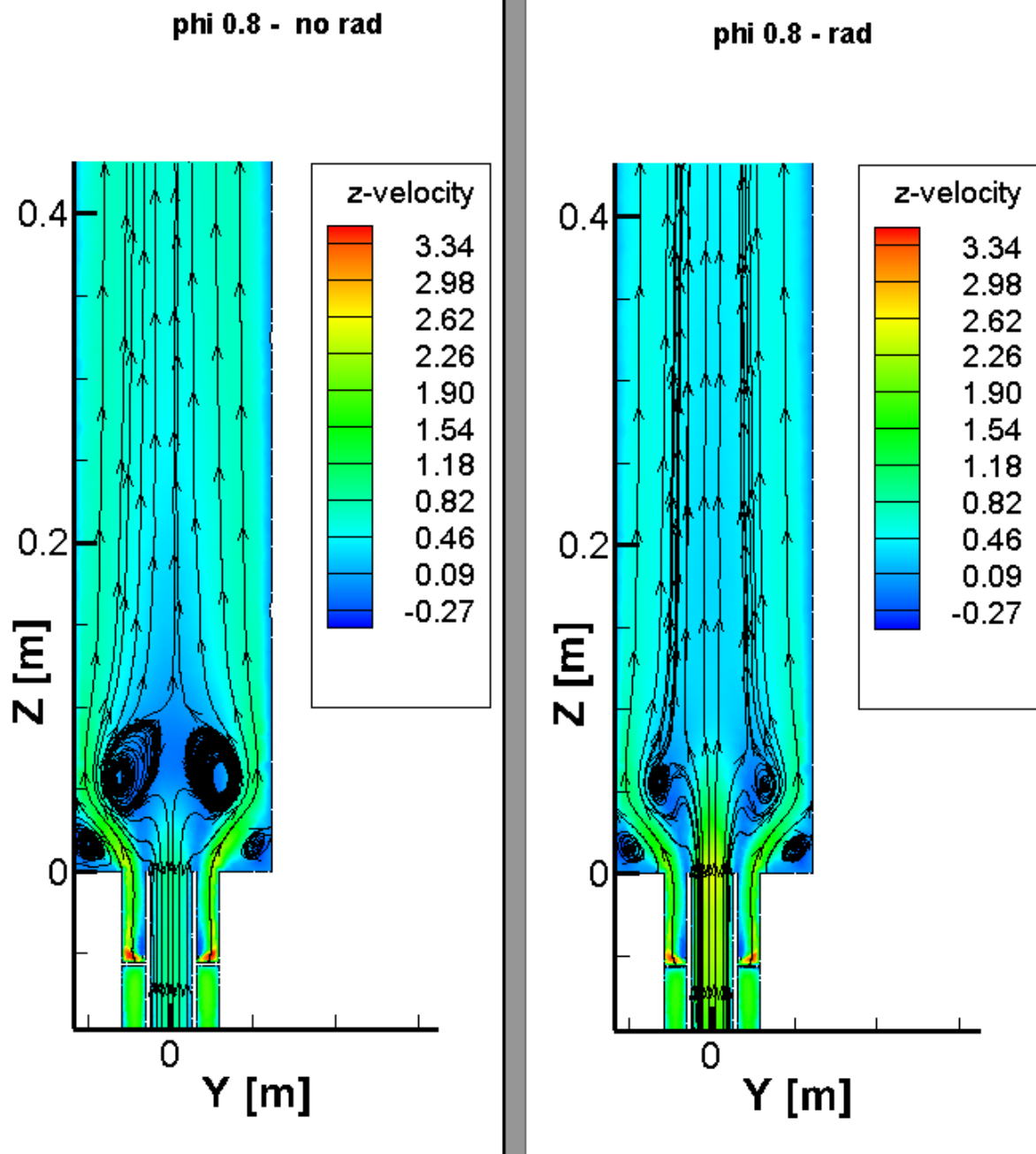


Fig. 4.8. Contornos de velocidad en el eje Z (Rad vs no rad) para  $\phi = 0.8$

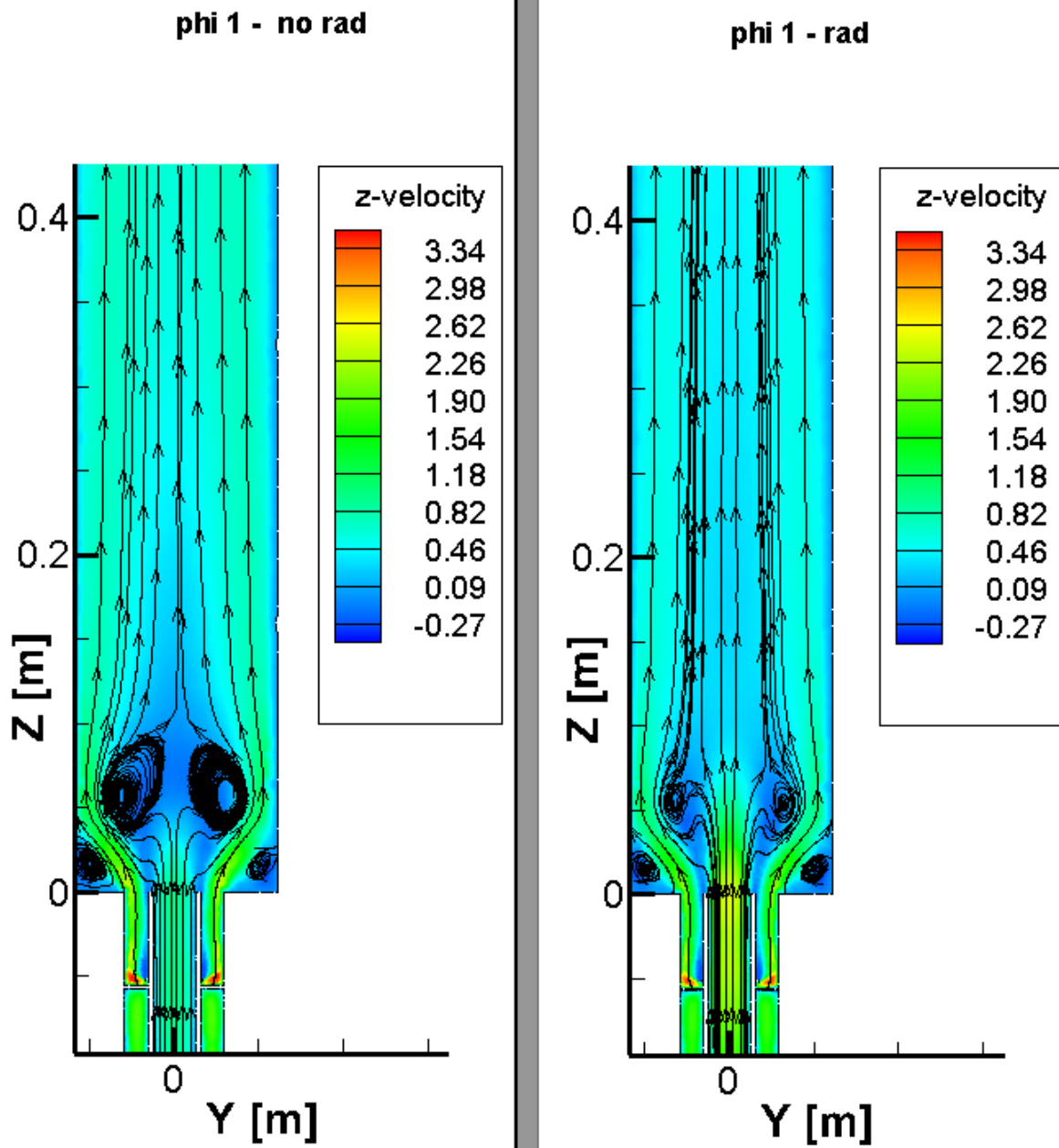


Fig. 4.9. Contornos de velocidad en el eje Z (Rad vs no rad) para  $\phi = 1$

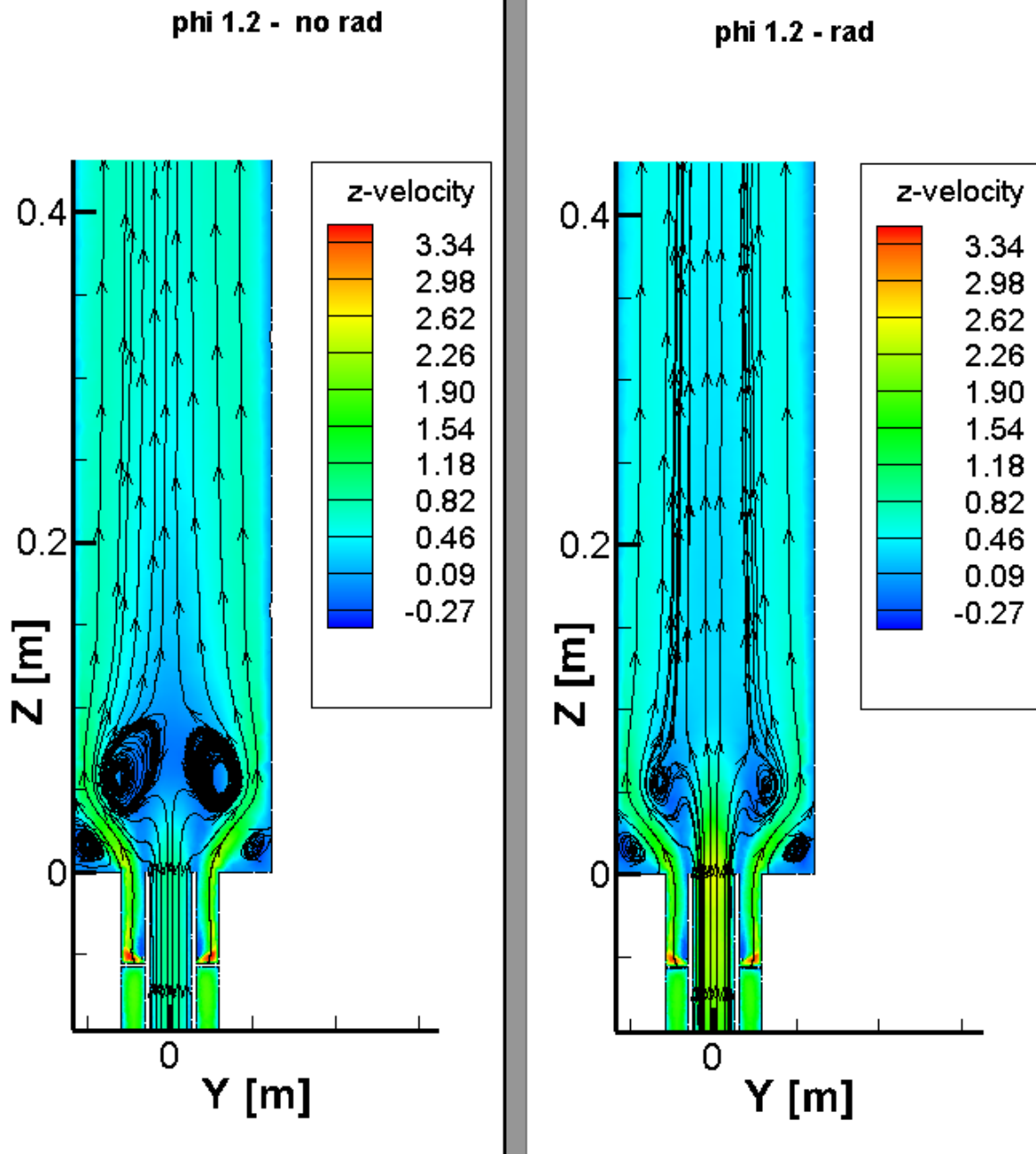


Fig. 4.10. Contornos de velocidad en el eje Z (Rad vs no rad) para  $\phi = 1.2$

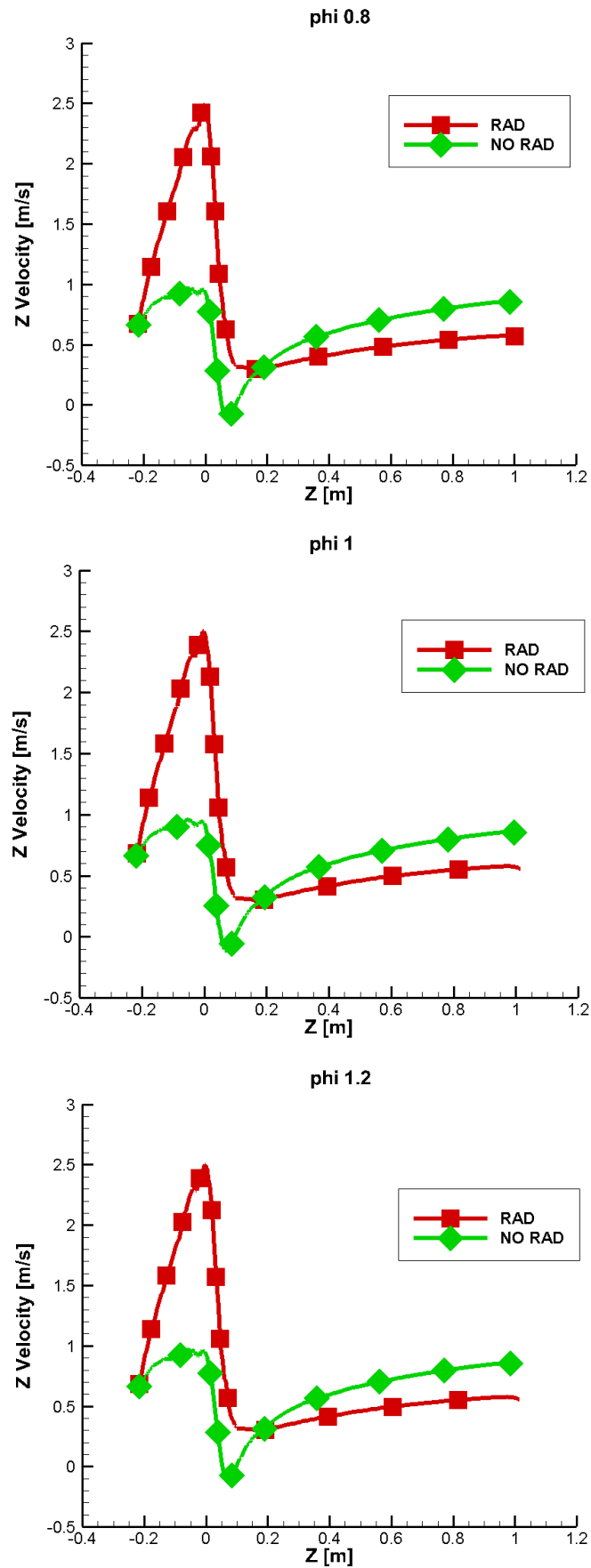


Fig. 4.11. Velocidades axiales a lo largo del eje Z (Rad vs no rad) para  $\phi = 0.8$ ,  $\phi = 1$  y  $\phi = 1.2$

Con la Fig. 4.11 se puede ver la diferencia en las velocidades en el eje Z entre los modelos con y sin radiación.

- En primer lugar, para cotas Z negativas (interior de la tobera central, antes de la descarga) la velocidad aumenta, como consecuencia de la capa límite. Sin embargo, este efecto de la capa límite se ve amplificado, en el caso de radiación, por el aumento de temperatura en las paredes de la tobera central, que fuerza al combustible a aumentar su velocidad mucho más en el centro de la tobera.
- En la descarga se produce una disminución de la velocidad, pues aumenta el diámetro
- Por último, a medida que se avanza a lo larga de la cámara de combustión la velocidad en el centro de la misma va aumentando debido a la combustión del metano. Sin embargo, este aumento es mayor en el caso de no existir radiación, debido a las temperaturas más altas alcanzadas.

Nuevamente, apenas hay diferencias entre distintas estequiometrías.

Las Fig. 4.12 y 4.13 permiten comprobar si se está en régimen laminar o turbulento. Puesto que las diferencias de velocidad entre distintas estequiometrías son despreciables, únicamente se analizarán los valores de Reynolds para  $\phi = 1$ . Se han realizado dos gráficas por el hecho de que el valor del Reynolds depende del diámetro de la tobera, y en este caso nuestro diámetro varía en la tobera interior ( $D = 0.025$  m) y en la cámara de combustión ( $D = 0.121$  m).

La Fig. 4.12 es únicamente válida para la zona de la cámara de combustión (cotas  $Z > 0$ ), mientras que la Fig. 4.13 únicamente es válida para la tobera interior (cotas  $Z < 0$ ).

Como se puede apreciar en ambas figuras, en ningún caso se supera el valor de Reynolds 2300, por lo que se está en régimen laminar. Esto implica que al final de la cámara de combustión se deberá tener un perfil de velocidades parabólico como el que se mostró en la Fig. 3.6.



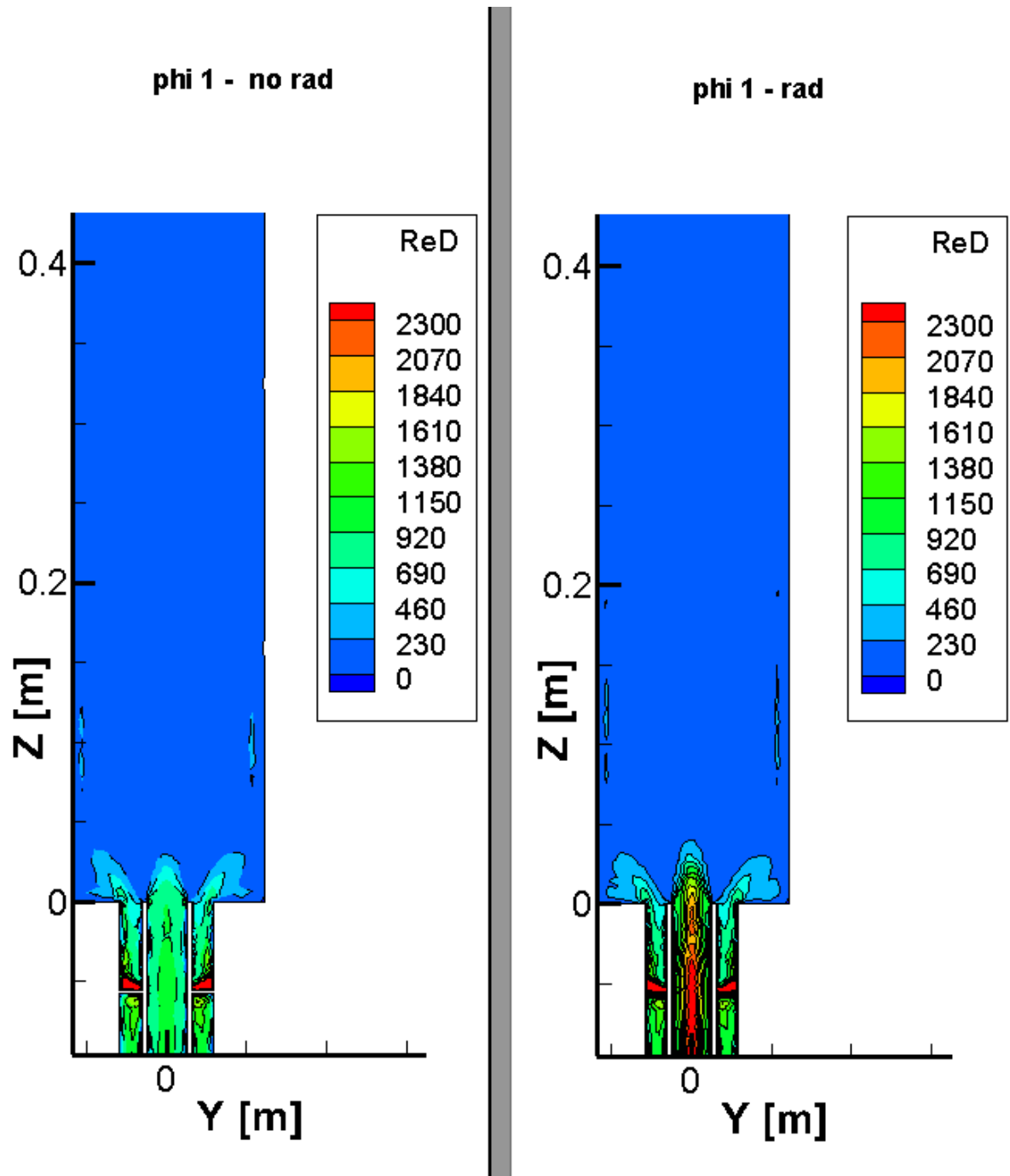


Fig. 4.12. Números de Reynolds con  $D = 0.121$  m (diámetro de la cámara de combustión) (Rad vs no rad) para  $\phi = 1$

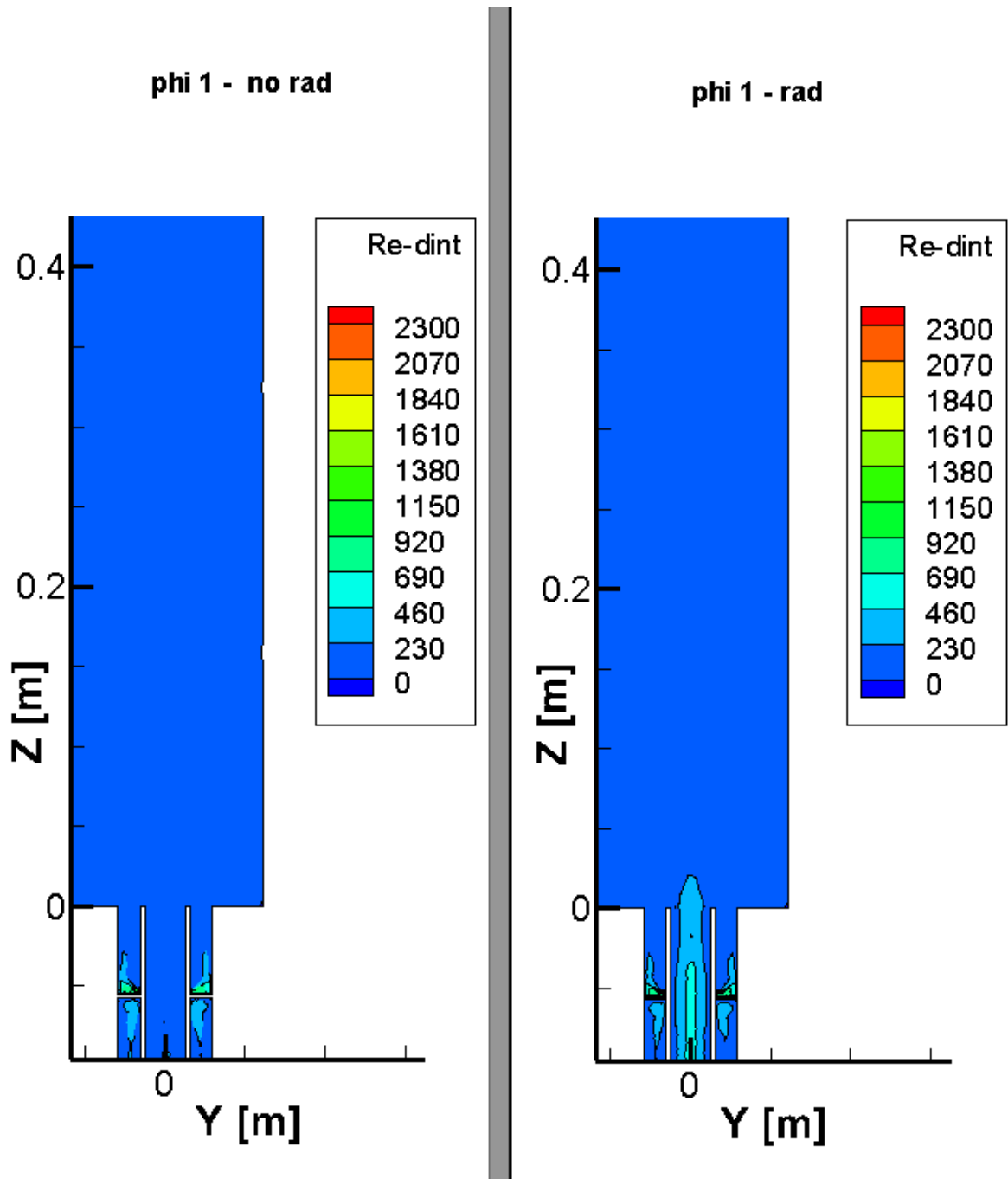
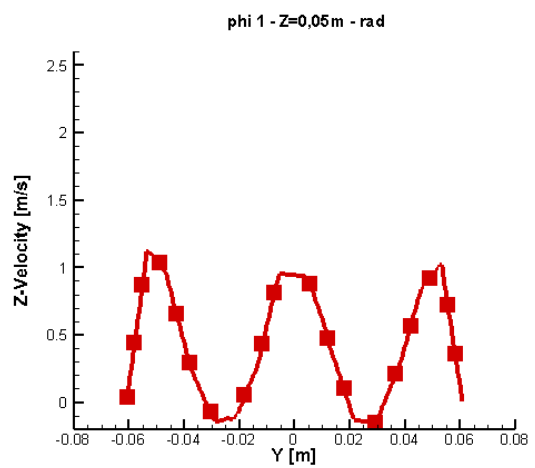
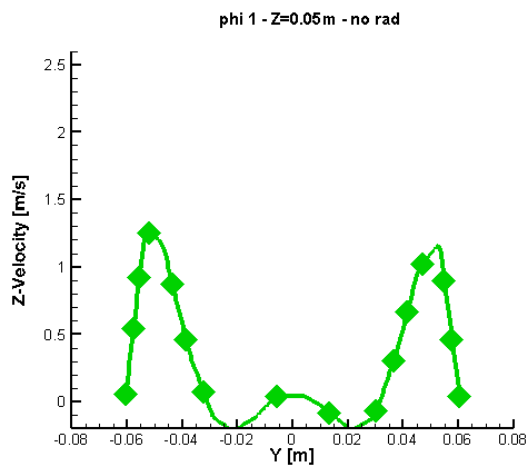
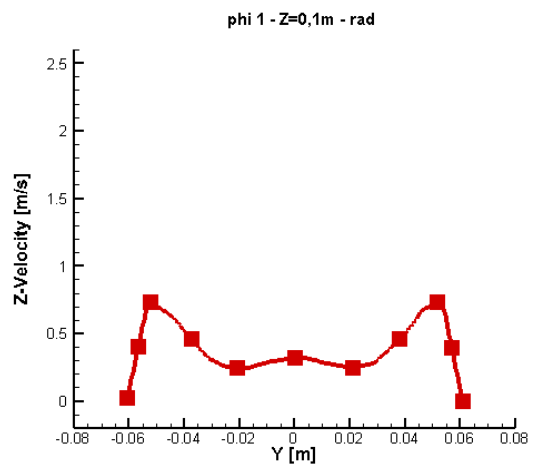
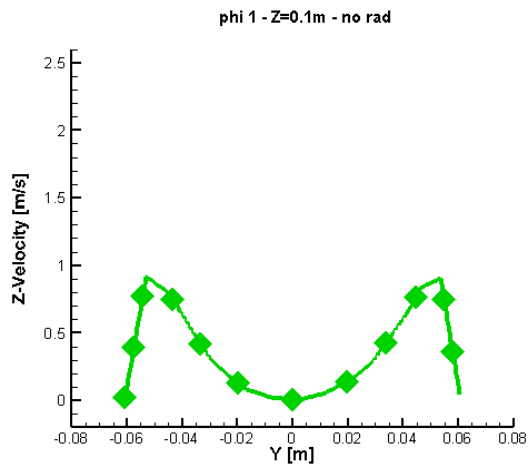
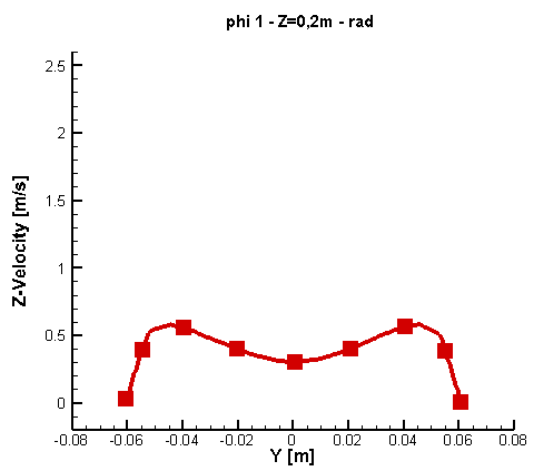
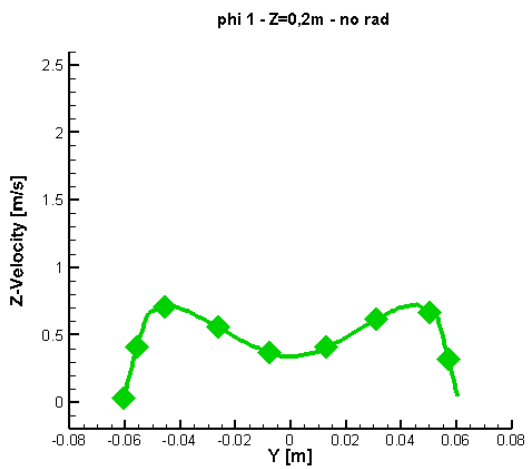
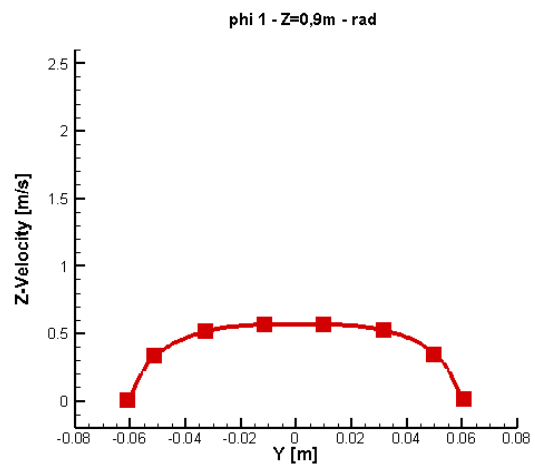
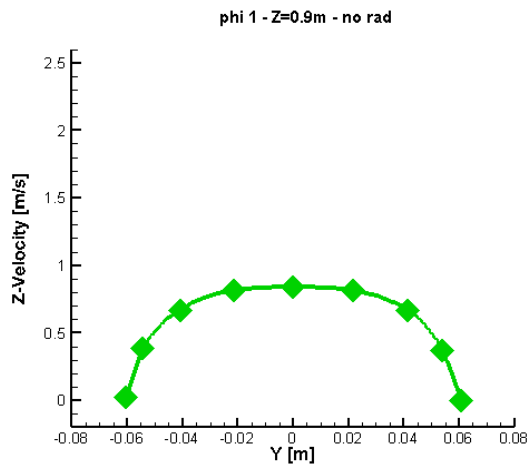


Fig. 4.13. Números de Reynolds con  $D = 0.025$  m (diámetro de la cámara de la tobera interior)  
(Rad vs no rad) para  $\phi = 1$



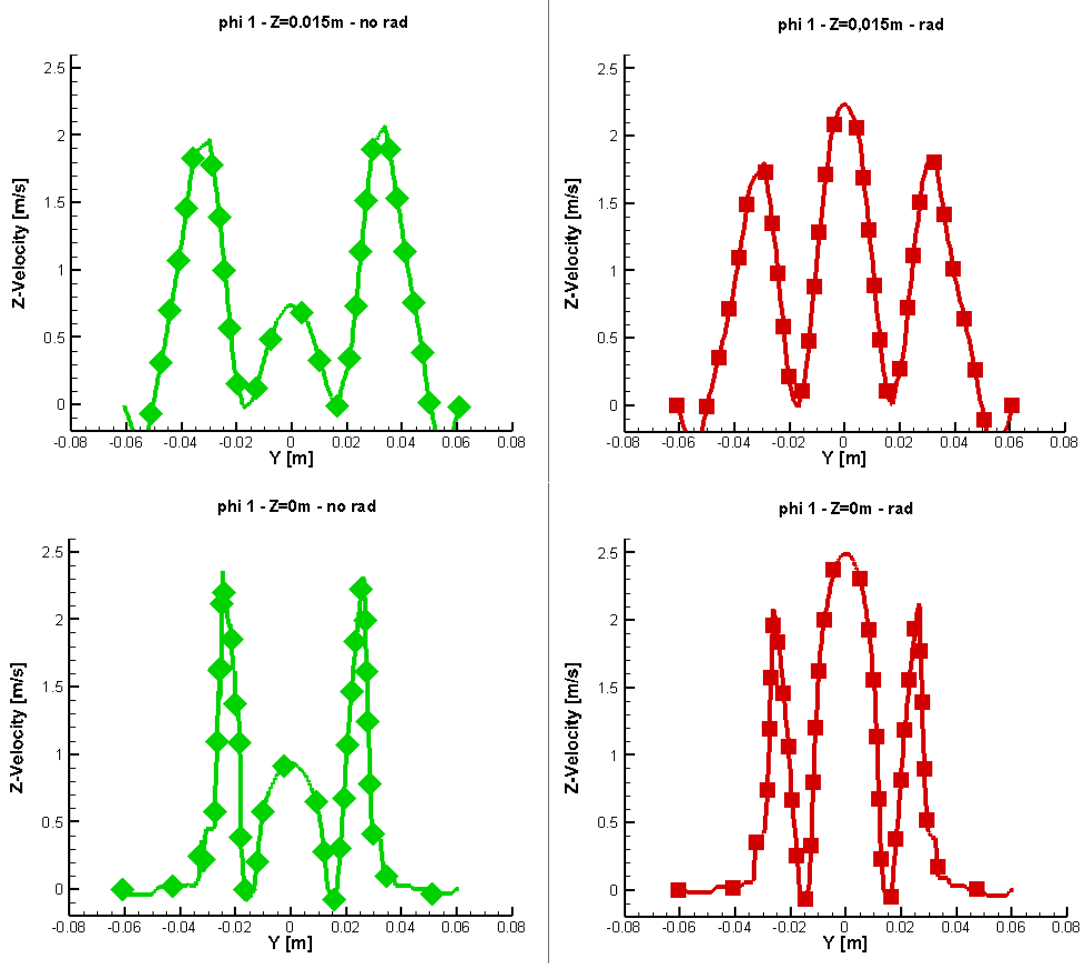


Fig. 4.14. Perfiles radiales de velocidades axiales para distintas cotas Z (Rad vs no rad) para  $\phi = 1$

En la Fig. 4.14 se presentan los perfiles de velocidades axiales para distintas cotas Z (posiciones axiales de la cámara de combustión), únicamente para  $\phi = 1$ . En ella se observa lo que se comentó anteriormente. La velocidad de descarga de la tobera central es mayor en el caso de aplicar radiación. Dicha diferencia de velocidad en la descarga se puede ver prácticamente hasta la cota  $Z = 0.2$  m.

En cuanto a las velocidades en la periferia de la cámara de combustión, las diferencias son menores.

También se puede apreciar la presencia de flujos reversos en ambos casos, que reflejan la presencia de la IRZ y la ORZ.

Por último, para la cota  $Z = 0.9$  m la forma del perfil de velocidades es similar para los casos de radiación y no radiación, siendo la magnitud de la velocidad inferior en el caso de radiación, como ya se comentó anteriormente.

### 4.3. Especies químicas

En este apartado se comprobará si la radiación afecta a la formación de las especies químicas. Evidentemente, si se comparan las diferentes estequiometrías sí que se espera encontrar diferencias sustanciales en las especies.

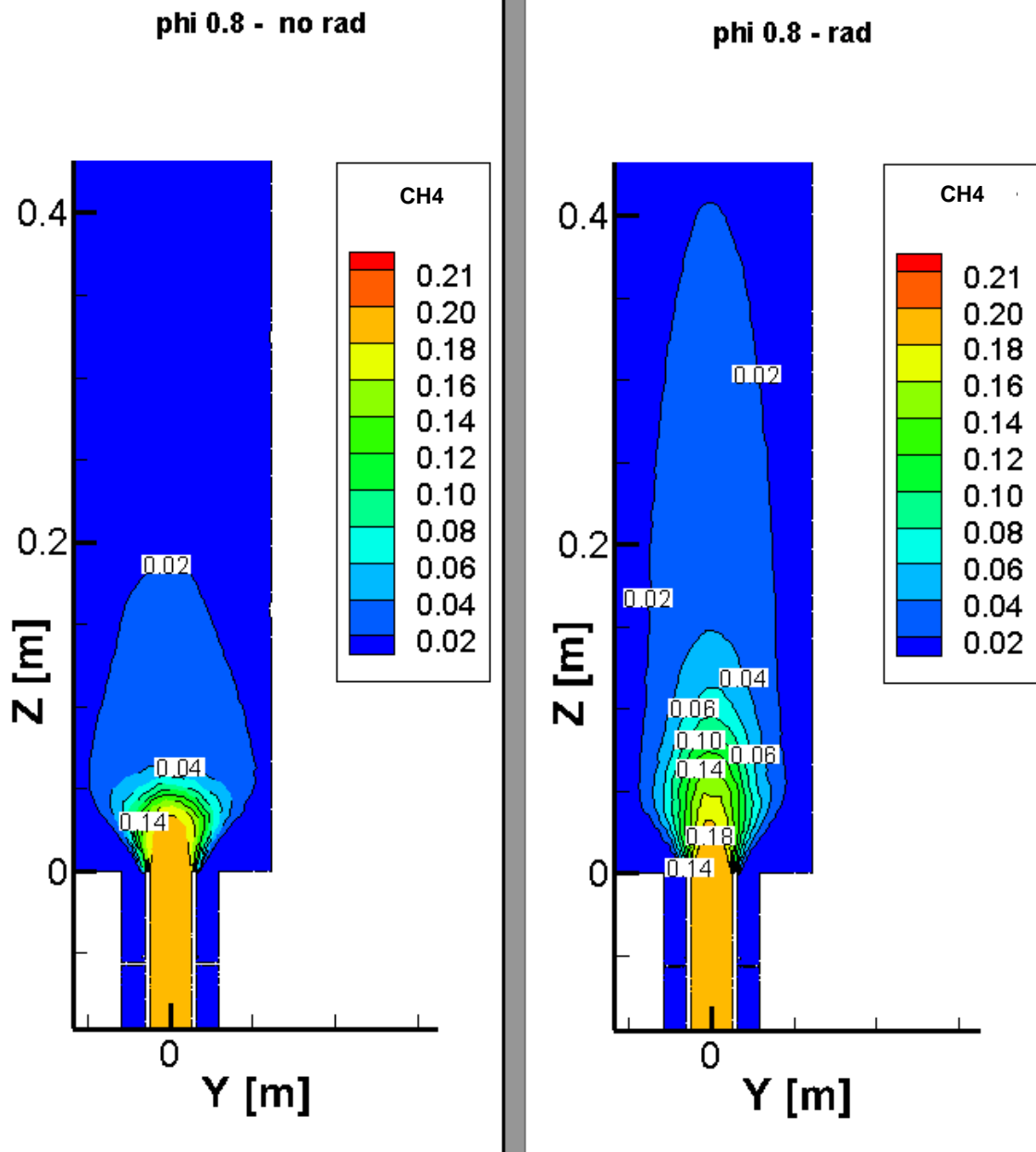


Fig. 4.15. Contornos de fracción másica de CH<sub>4</sub> (Rad vs no rad) para  $\phi = 0.8$

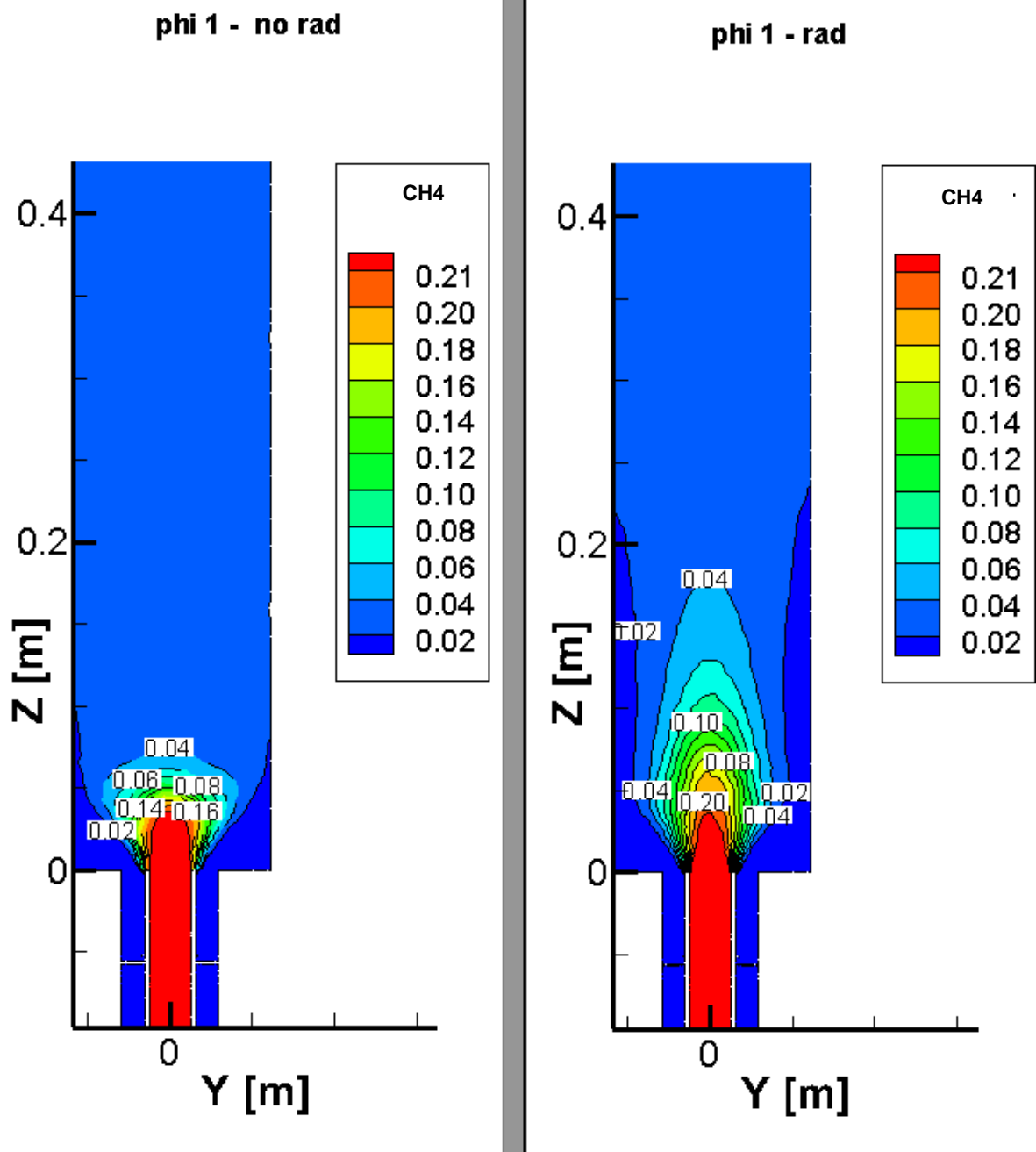


Fig. 4.16. Contornos de fracción másica de CH<sub>4</sub> (Rad vs no rad) para  $\phi = 1$

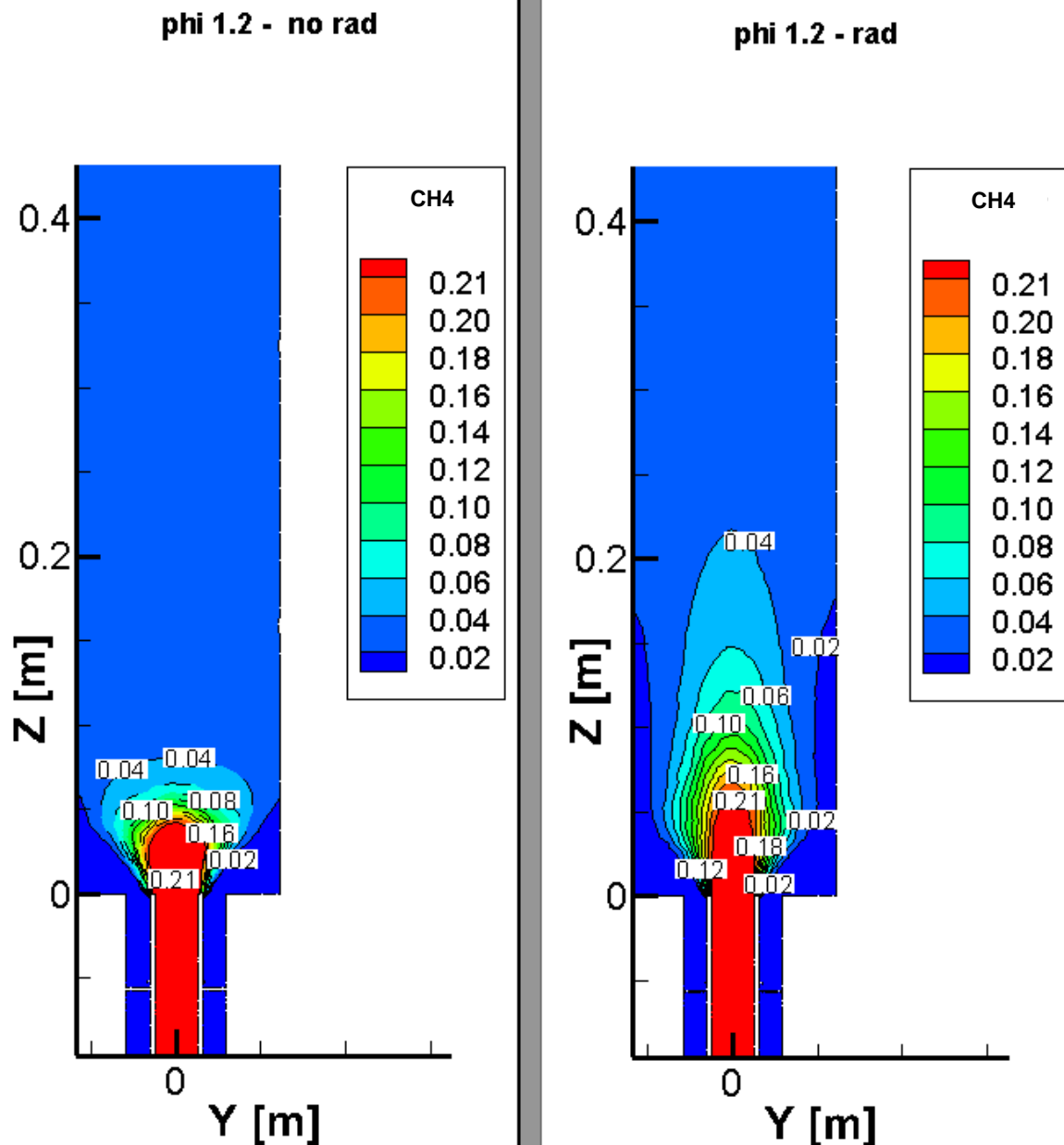


Fig. 4.17. Contornos de fracción másica de CH<sub>4</sub> (Rad vs no rad) para  $\phi = 1.2$

Las Fig. 4.15, 4.16 y 4.17 muestran, a diferencia de los apartados anteriores, que en las especies químicas sí que hay diferencia tanto comparando el modelo de radiación y no radiación, como comparando unas estequiometrías con otras.

- **Radiación:** Si se compara el hecho de aplicar o no el modelo de radiación, se aprecia que, al igual que se observó en el apartado 4.1, que la llama (y por tanto la concentración de CH<sub>4</sub>) es más alargada y estrecha en el caso de radiación. La mayor parte del CH<sub>4</sub> se concentra en el eje de la cámara de combustión y se extiende hasta más del doble de distancia de la que lo hace en el modelo sin radiación. Por ejemplo, para  $\phi = 0.8$  la concentración de CH<sub>4</sub> de 0.02 se alcanza, en el caso sin radiación, prácticamente en la cota  $Z = 0.2$  m, mientras que en el caso de radiación no se alcanza hasta pasar ligeramente  $Z = 0.4$  m.

- Estequiometría:** Si se comparan las distintas estequiometrías, se pueden apreciar las características propias de una mezcla rica, y pobre. Para el caso de  $\phi = 0.8$  (mezcla pobre), se ve que todo el combustible se consume, por lo que la llama se cierra en torno a la cota  $Z = 0.2$  m para el caso sin radiación y  $Z = 0.4$  m para el caso con radiación. En cambio, para el caso de  $\phi = 1.2$  (mezcla rica) se observa que el combustible no se consume y la llama se abre, pudiendo llegar incluso hasta las paredes de la cámara de combustión.

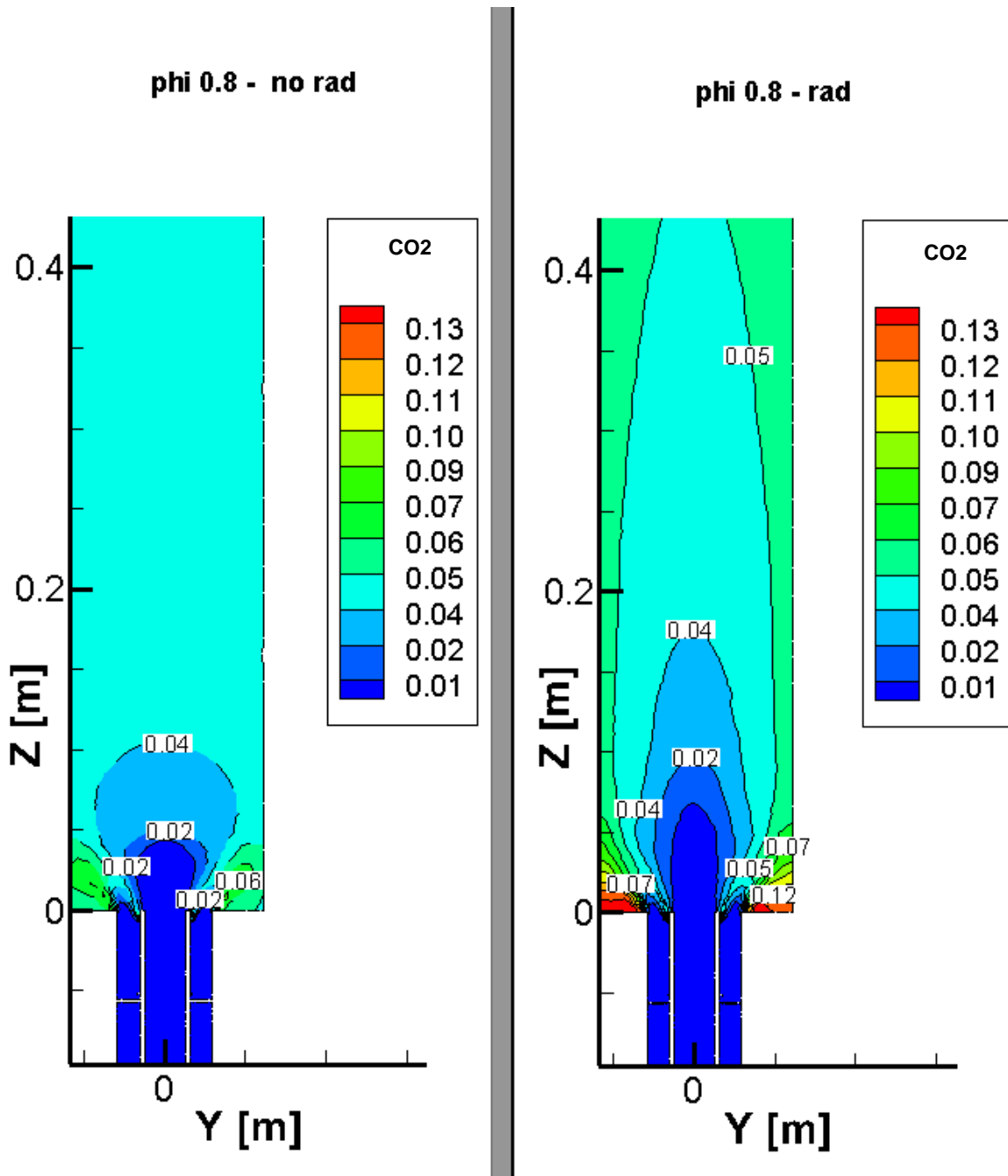


Fig. 4.18. Contornos de fracción másica de CO<sub>2</sub> (Rad vs no rad) para  $\phi = 0.8$



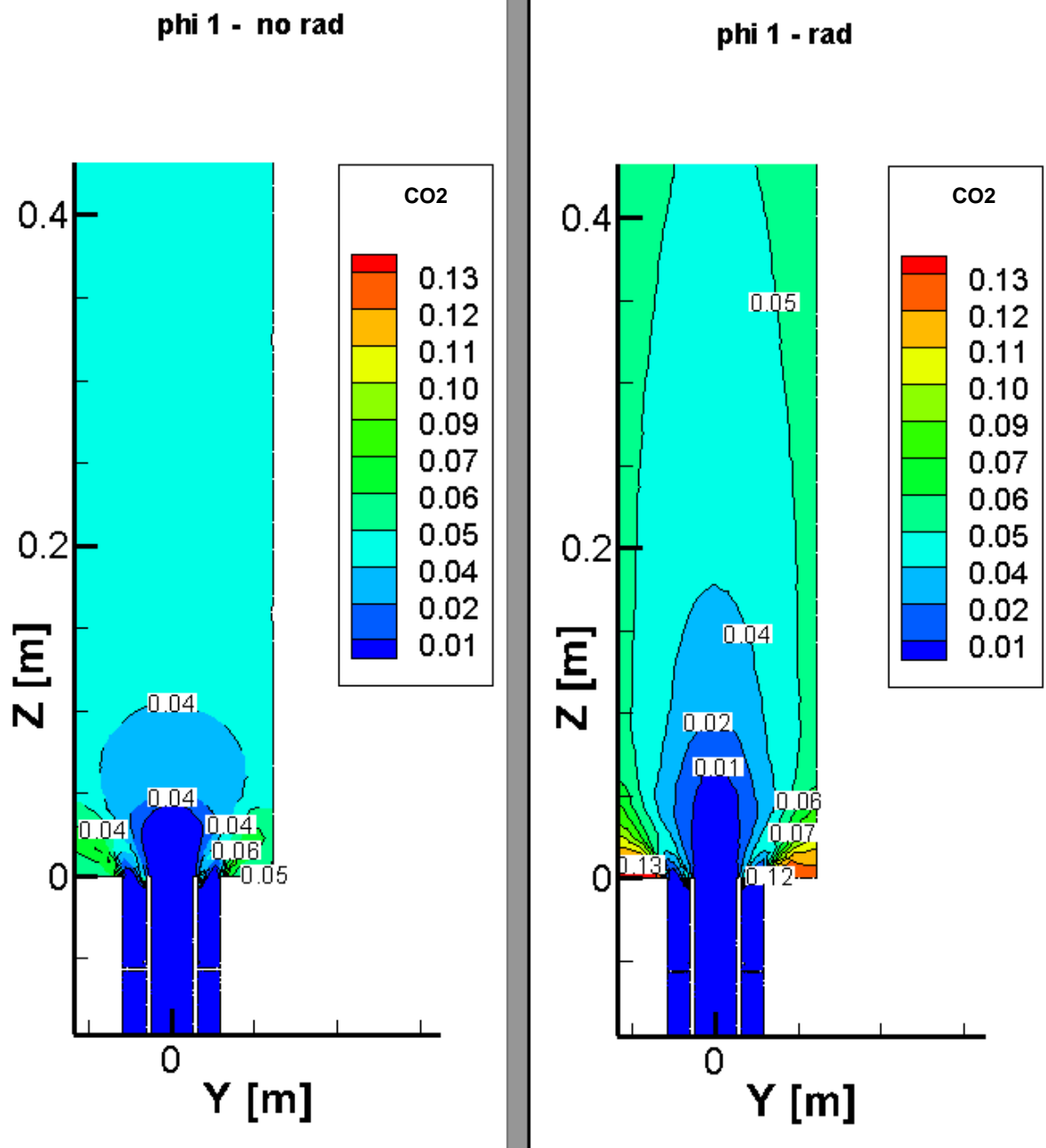


Fig. 4.19. Contornos de fracción másica de CO<sub>2</sub> (Rad vs no rad) para  $\phi = 1$

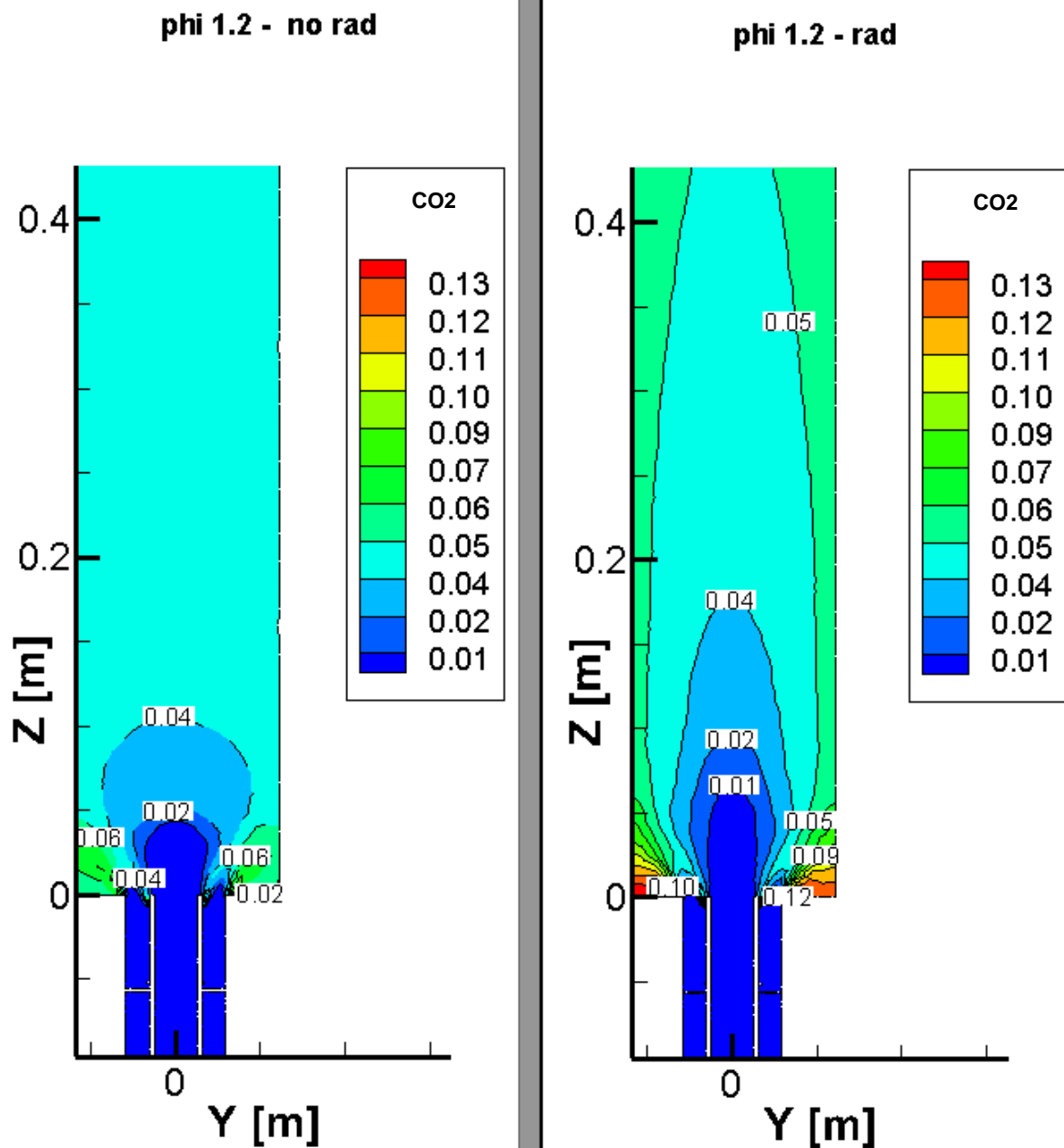


Fig. 4.20. Contornos de fracción másica de CO<sub>2</sub> (Rad vs no rad) para  $\phi = 1.2$

Las Fig. 4.18, 4.19 y 4.20 muestran los contornos de CO<sub>2</sub> para los casos de aplicar el modelo de radiación y no aplicarlo, para distintas estequiometrías.

- **Radiación.** Nuevamente se vuelven a apreciar cambios significativos si se resuelve el modelo de radiación. Al igual que ocurría anteriormente con el CH<sub>4</sub> aplicando radiación, la mayor parte del CO<sub>2</sub> se concentra en torno al eje Z, en una zona alargada y estrecha. Además, dicha concentración aumenta a medida que se avanza en el eje Z. Otra diferencia que se encuentra entre los modelos con y sin radiación es que se concentra una mayor cantidad de CO<sub>2</sub> en la ORZ, como consecuencia de dichos torbellinos que se generan.
- **Estequiometría.** No se encuentran diferencias apreciables.

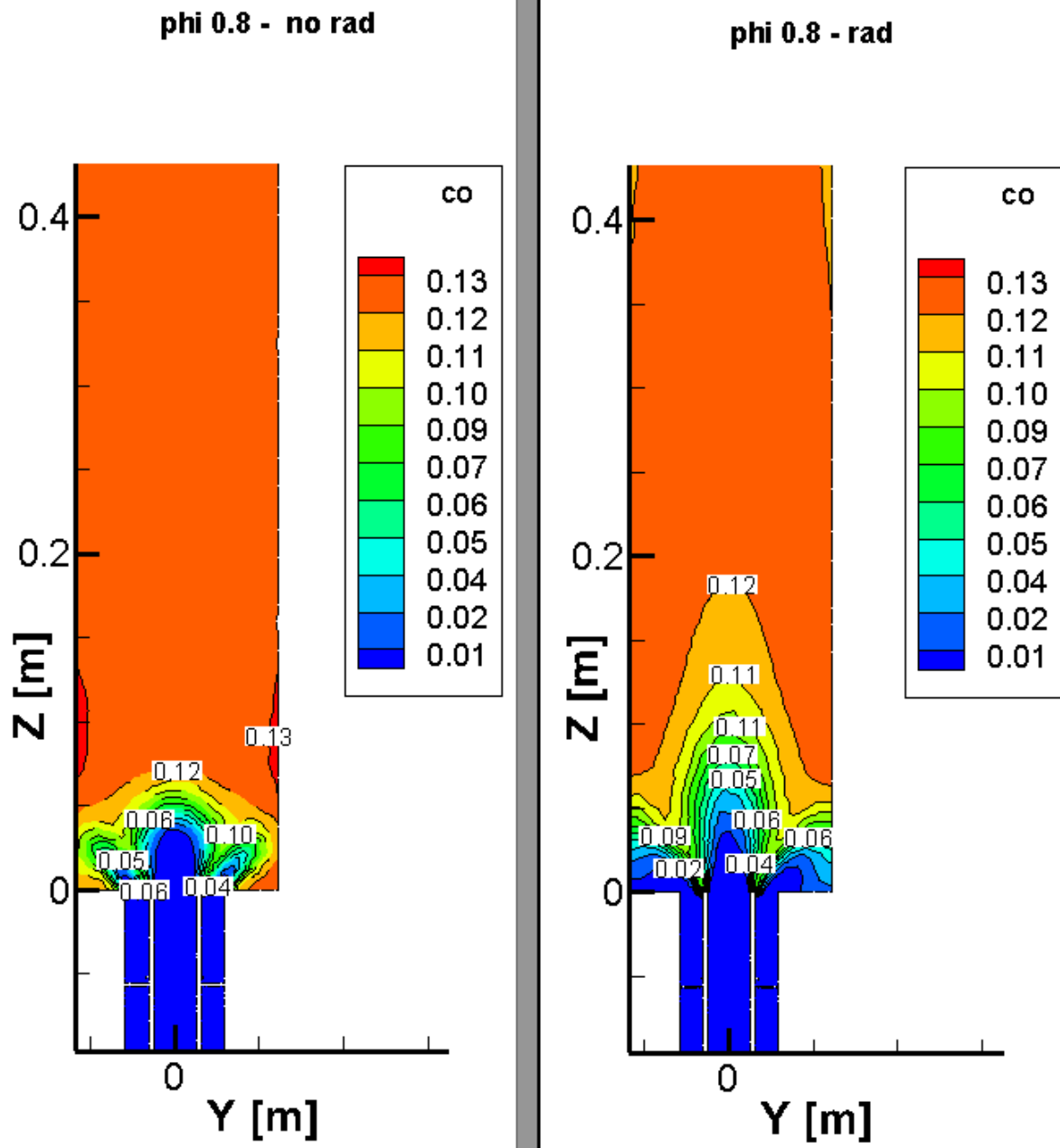


Fig. 4.21. Contornos de fracción másica de CO (Rad vs no rad) para  $\phi = 0.8$

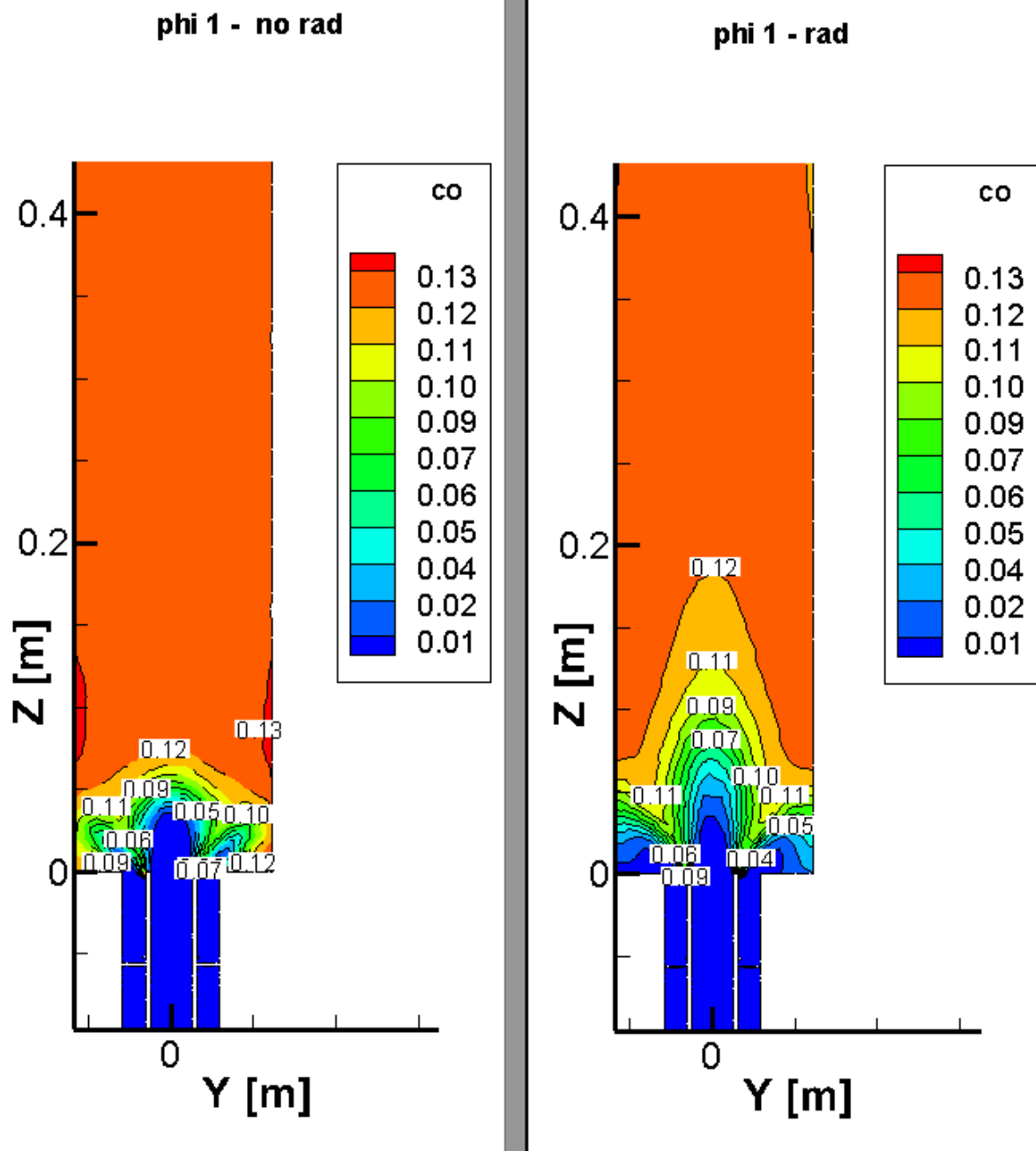


Fig. 4.22. Contornos de fracción másica de CO (Rad vs no rad) para  $\phi = 1$

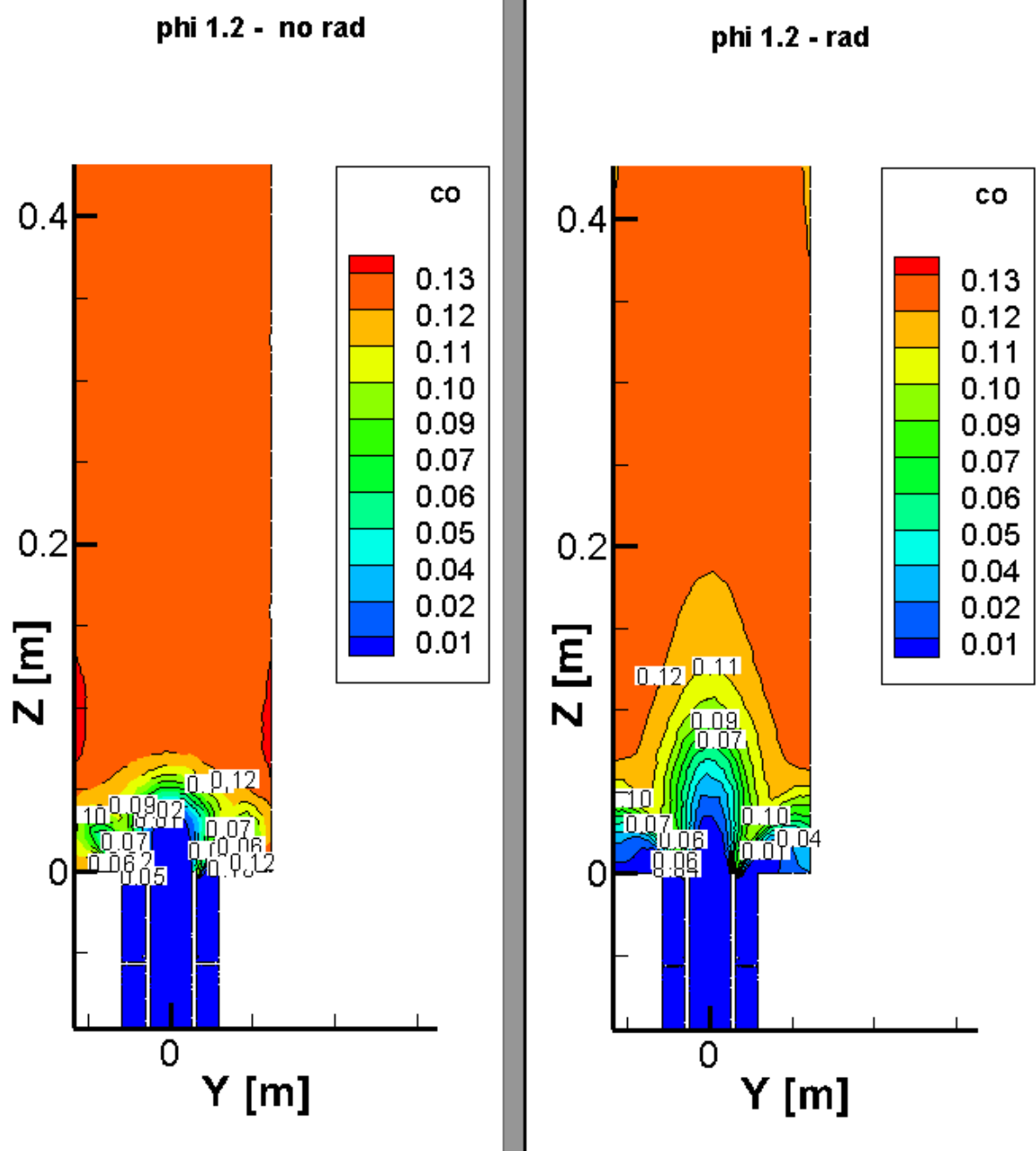


Fig. 4.23. Contornos de fracción másica de CO (Rad vs no rad) para  $\phi = 1.2$

Las conclusiones que se pueden extraer del estudio del CO de las Fig. 4.21, 4.22 y 4.23 son idénticas a las obtenidas del estudio del CO<sub>2</sub>. Este estudio se ha realizado por analogía con el apartado 3.3.



## CAPÍTULO 5. ANÁLISIS DE NOX

Los óxidos de nitrógeno son uno de los componentes más contaminantes que se pueden producir en un proceso de combustión. De hecho, las normativas medioambientales lo incluyen en sus informes de cara a tratar de que sus niveles sean controlados.

Los óxidos de nitrógeno (NOx) se generan debido a la reacción del N<sub>2</sub> existente en el aire de la combustión como consecuencia de las altas temperaturas que se alcanzan en el proceso. De ahí que la temperatura de la combustión sea uno de los principales aspectos a controlar para tratar de reducir las emisiones de NOx.

Por ese motivo, este capítulo se dedicará al análisis de las emisiones de NOx en el quemador Swirl en el que se centra este estudio. Todos los cálculos se han realizado en el modelo de reacción EDC, para un valor  $\phi = 1.2$ .

Se comienza realizando un análisis de la fracción másica de emisiones de NO del modelo y, puesto que la formación de NOx depende de las temperaturas de los gases de escape, se analizarán paralelamente los contornos de temperatura.

**phi 1.2 - EDC - NOx**

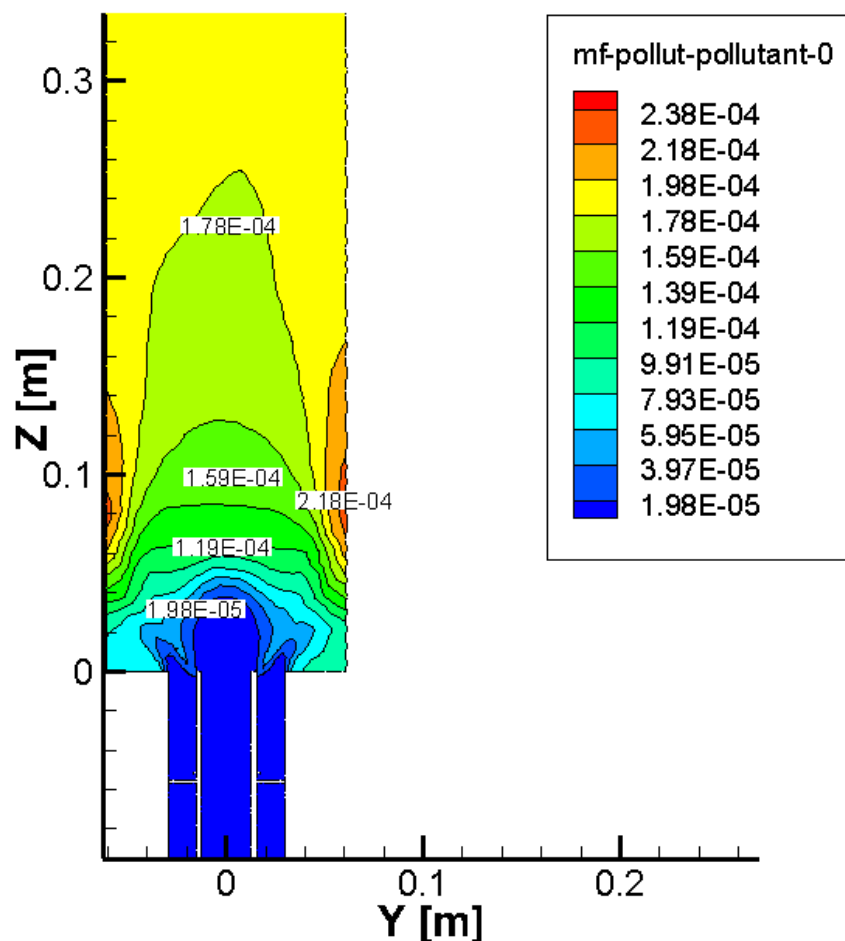


Fig. 5.1. Contornos de fracción másica de NO, modelo EDC para  $\phi = 1.2$

## phi 1.2 - EDC - NOx

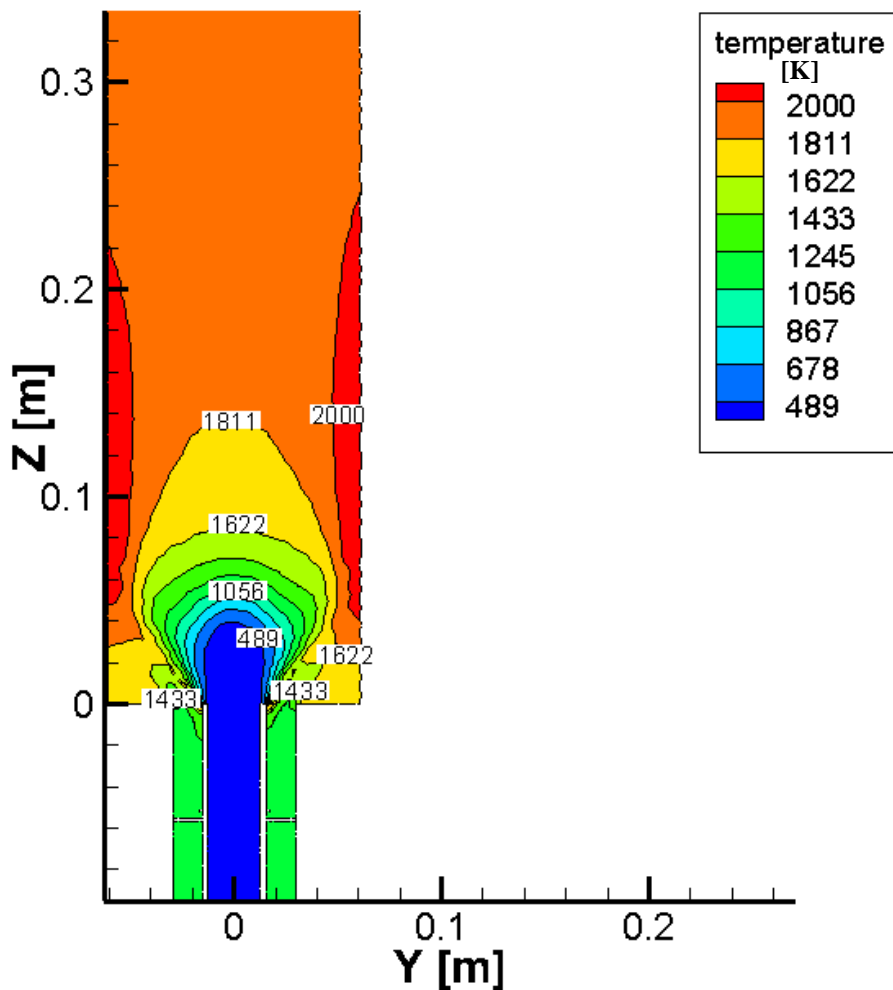


Fig. 5.2. Contornos de temperatura, modelo EDC para  $\phi = 1.2$

Tal y como se puede observar en las Fig. 5.1 y 5.2, efectivamente se alcanzan temperaturas suficientemente altas como para dar lugar a la formación de NOx. A partir de una cota  $Z = 0.3$  m se observa que, puesto que no aumenta más la temperatura (ya que la combustión ha finalizado), la fracción másica de NO no aumenta, quedándose en un valor entre  $1.78 \cdot 10^{-4}$  y  $1.98 \cdot 10^{-4}$  (178 y 198 ppm).

Además, cabe destacar que la Fig. 5.1 muestra que la máxima concentración de NO se encuentra en las paredes de la cámara de combustión, en una cota en torno a  $Z = 0.1$  m, que coincide, en la Fig. 5.2, con la zona de máxima temperatura (por encima de los 2000 K).

En la Fig. 5.3 se muestra el ratio de formación de NO. Dicha figura muestra que la mayor parte del NO no se genera, como se podría pensar al observar los contornos de temperatura (Fig. 5.2), en las paredes de la cámara de combustión, sino que lo hace justo en la zona interior de la salida de la tobera anular. En dicha zona, tal y como se explicó en el capítulo 3, se produce el fenómeno de flashback, además de una serie de turbulencias que hacen que combustible y comburente no se mezclen bien y la mezcla esté muy aireada, por coincidir con la salida del comburente. Esto hace que la mezcla sea pobre y aumenten la temperatura en dicha zona (capítulo 3,



Fig. 3.2), lo que hace que este sea un lugar muy propenso para favorecer la generación de NOx.

La formación de NO se concentra principalmente en la zona intermedia entre la IRZ y la ORZ. Esto es así porque en estas zonas siempre se tendrá una buena mezcla entre combustible y comburente que es difícil que llegue a ser pobre, debido a los torbellinos que se generan. Por tanto, se llega a la conclusión de que tanto la IRZ como la ORZ son zonas que no favorecen la generación de NO.

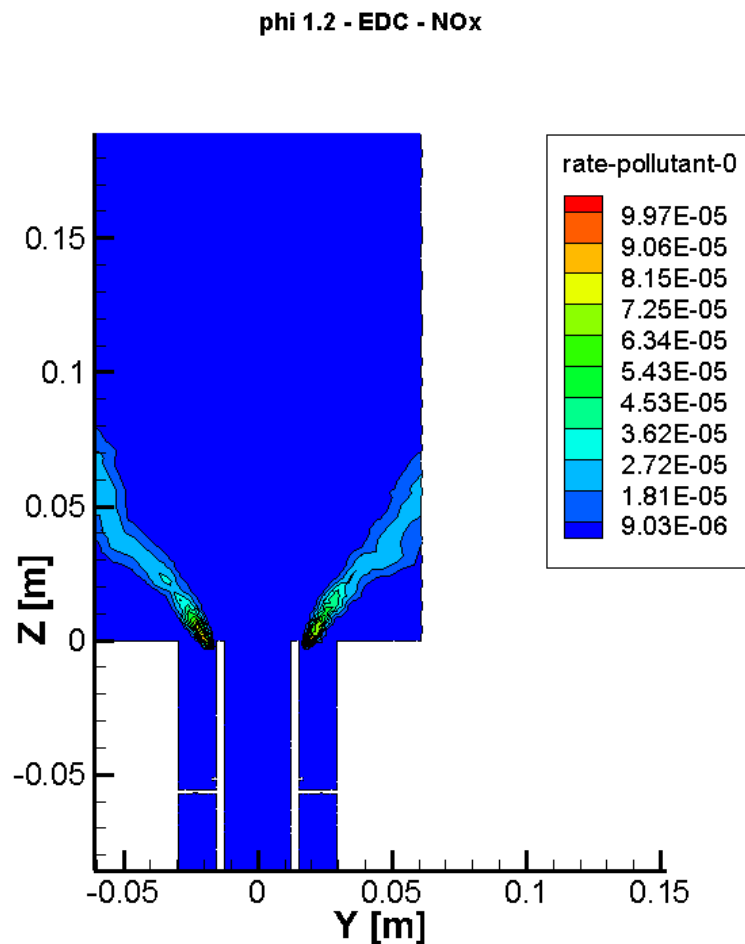


Fig. 5.3. Ratio de formación de NO, modelo EDC para  $\phi = 1.2$

Posteriormente, en el capítulo 6 se compararán estos resultados con los obtenidos por otros autores.



# CAPÍTULO 6.

## COMPARACIÓN CON OTRAS FUENTES

---

### 6.1. Estado del arte

No son pocos los autores que se han dedicado al estudio de quemadores de flujo Swirl, tanto de forma experimental [Roback, 1983], [Janus, 2007], [Wegner, 2005], [Choi, 2019]; como numérica [Wegner, 2005], [Meier, 2000], [Choi, 2019]. Para averiguar si el modelo que se ha planteado en este estudio es válido o, por el contrario, requiere un mayor perfeccionamiento en ciertos aspectos, este capítulo se dedicará a comparar los resultados obtenidos con el modelo propuesto con los obtenidos por otros autores.

Dichos autores son:

- **Roback R., Johnson B.V., “Mass and momentum turbulent transport experiments with confined swirling coaxial jets”, [Roback, 1983].** Estos autores realizaron experimentos utilizando un quemador de metano similar al del modelo en cuanto a geometría y modo de funcionamiento: flujo no premezclado y confinado. Sin embargo, no realizaron experimentos con combustión, únicamente estudiaron el fenómeno de mezcla. Ensayaron distintos ángulos para los álabes que generan la rotación, dando lugar a diferentes números de Swirl (entre 0.6 y 1.4). Por tanto, parece lógico empezar por estos autores puesto que, a priori, debería coincidir en mayor medida con el modelo propuesto.
- **Janus B., Dreizler A., Janicka J., “Experiments on swirl stabilized non-premixed natural gas flames in a model gas turbine combustor”, [Janus, 2007].** Estos autores realizaron una serie de medidas experimentales en un quemador de gas natural, con flujo Swirl no premezclado, no confinado y, además, con la existencia de combustión. Si bien la zona de descarga (tanto para combustible como para comburente) tiene una geometría distinta a la utilizada en los modelos de este estudio, la componente tangencial que genera el flujo rotante ( $S = 1.2$ ) se la proporciona al comburente, al igual que en los modelos analizados en los capítulos anteriores.
- **Wegner B., Janus B., Sadiki A., Dreizler A., Janicka J., “Study of flow and mixing in a generic gt combustor using LES”, [Wegner, 2005].** En el informe que realizaron estos autores, elaboraron un modelo de un quemador de gas natural, en condiciones isoterma, y se centraron en comparar los resultados de dicho modelo (empleando un modelo de turbulencia LES) con los obtenidos experimentalmente en una turbina de gas de similares características. Tanto el modelo como las medidas experimentales utilizan un flujo no premezclado, no confinado y sin reacción. Al igual que en el modelo estudiado en este informe, la componente tangencial de la velocidad se la proporciona al comburente, que entra por la tobera anular, si bien la geometría del quemador es distinta en ambos casos.
- **Meier W., Keck O., Noll B., Kunz O., Stricker W., “Investigations in the TECFLAM swirling diffusion flame: Laser Raman measurements and CFD calculations”, [Meier, 2000].** A diferencia de cualquiera de los autores anteriores y del modelo planteado en este proyecto, estos autores realizaron un modelo de un quemador de flujo swirl de flujo premezclado y no confinado. El objetivo de realizar una comparación con el modelo de estos autores es ver

qué diferencias hay entre un flujo premezclado y uno no premezclado y ver si, para una distancia del eje suficientemente alejada, ambos tipos de flujos pudieran llegar a ser idénticos.

- **Choi M., Park Y., Li X., Sung Y., Park S., Moon K., Choi G., “Study on flame structures and emission characteristics according to various swirl combinations and fuel compositions in a CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/CO syngas swirl-stabilized combustor”, [Choi, 2019].** Estos autores no utilizaron un concepto de flujo swirl como el empleado en el modelo objeto de este informe (con únicamente el flujo de comburente con una componente tangencial de la velocidad), sino que emplearon generadores del flujo swirl tanto en el combustible como en el comburente. Sin embargo, a diferencia de los autores anteriormente citados, sí que realizaron un análisis de las emisiones de NO<sub>x</sub>, y precisamente será ahí donde se centrará la comparativa entre ambos modelos.

En la tabla siguiente se resumen qué modelos de los propuestos en este estudio se compararán con cada uno de los estudios de los autores mencionados anteriormente:

*Tabla 6.1. Modelos propuestos para realizar la comparativa entre los estudios de otros autores y el modelo estudiado en el presente informe*

Autores	Modelo propuesto
[Roback, 1983]	No rxn; PDF yes rxn
[Janus, 2007]	PDF yes rxn
[Wegner, 2005]	No rxn
[Meier, 2000]	No rxn, PDF yes rxn
[Choi, 2019]	EDC NO <sub>x</sub>

## 6.2. Roback R., Johnson B. V., 1983

Puesto que estos autores no realizaron experimentos con combustión, el principal modelo que se utilizará para compararlo con el estudio de [Roback, 1983] será el modelo de no reacción, utilizado como punto de partida para el resto de estudios que se han realizado a lo largo de este informe. Además, y con el objetivo de vislumbrar las diferencias entre el uso de un modelo de combustión o no, también se mostrará el modelo de reacción PDF

Estos autores realizaron experimentos con números de Swirl diferentes, variando entre 0.6 y 1.4. El número de Swirl de nuestro modelo es aproximadamente 1.6, por lo que se pueden esperar ligeras diferencias entre ambos modelos

### 6.2.1. Velocidad del flujo

Como se puede ver en la Fig. 6.1, la curva del modelo de no reacción se aproxima bastante a las curvas de los estudios de [Roback, 1983]. La extensión en el eje Z de la IRZ es aproximadamente la misma tanto en el modelo de no reacción como en los experimentos de este autor, si bien las velocidades dentro de esa zona (flujo reverso) son mayores, en valor absoluto, en los ensayos experimentales.

Por último, en los ensayos experimentales de [Roback, 1983] se puede ver que la velocidad axial adimensional en  $Z = 0.5$  m va disminuyendo a medida que aumenta el número de Swirl, lo cual coincide con la definición de número de Swirl en la ecuación [Eq. 2.1]. Si se aumenta el número de Swirl significa que la relación entre velocidad tangencial y axial aumenta, por lo que es de esperar que esta última disminuya con el aumento del Swirl:

$$\uparrow S \rightarrow \uparrow IRZ \rightarrow \downarrow V_{z,eje}$$

Esta misma tendencia se repite con el modelo de no reacción. Su número de Swirl es superior al máximo que estudió [Roback, 1983] (1.6 frente a 1.4), y se sigue observando la tendencia de que la velocidad axial en  $Z = 0.5$  m disminuye con el aumento del Swirl.

Respecto al modelo de reacción PDF, a pesar de que la forma del gráfico del modelo propio coincide con la de [Roback, 1983], los valores difieren en gran medida. En el modelo propio las velocidades adimensionales alcanzadas son mucho mayores que las obtenidas por [Roback, 1983] en sus experimentos. Esto es debido a que, puesto que existe reacción, las temperaturas alcanzadas en el modelo PDF son más altas que si no hay reacción, lo que obliga a que la velocidad del flujo aumente. Este aumento de velocidad, además trae consigo una disminución de la extensión de la IRZ en el eje Z.

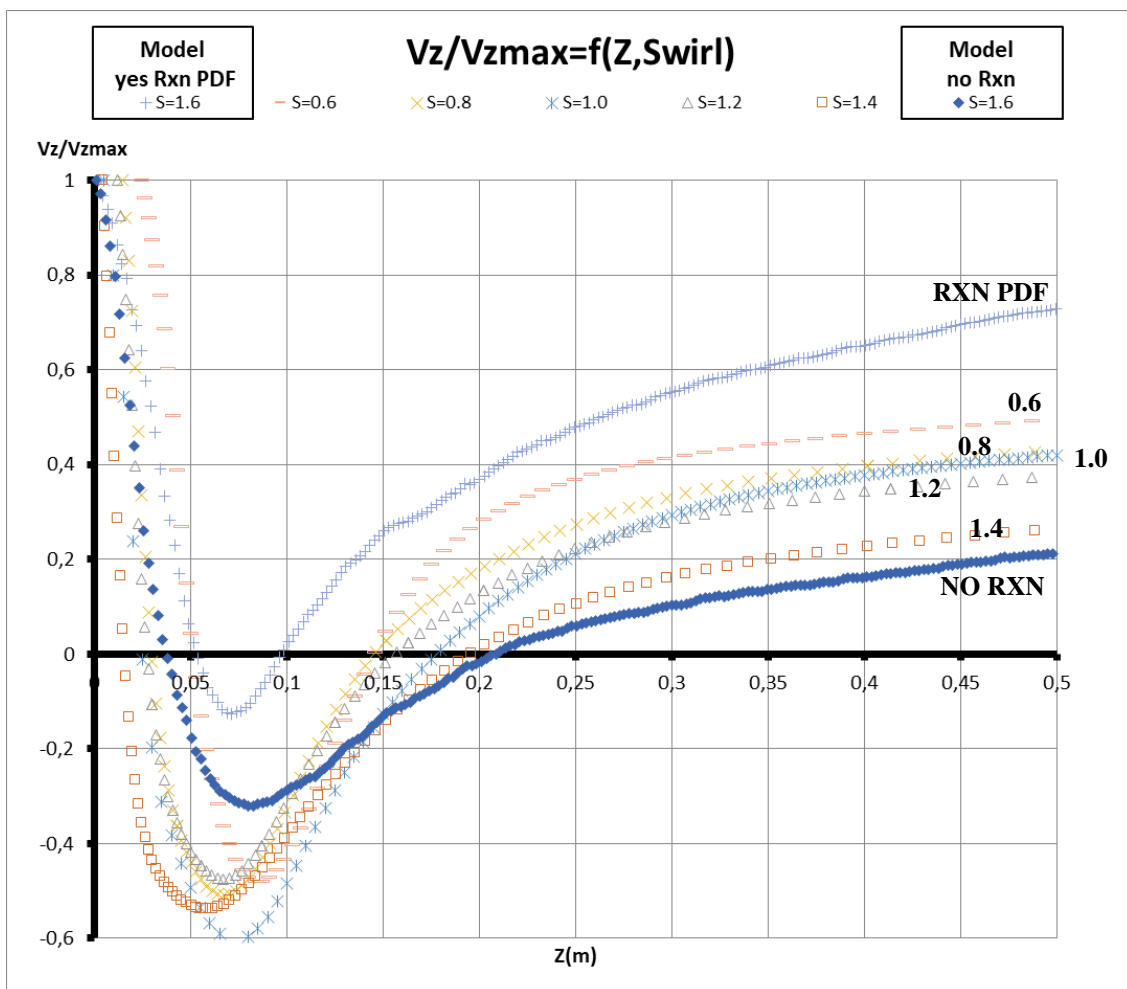
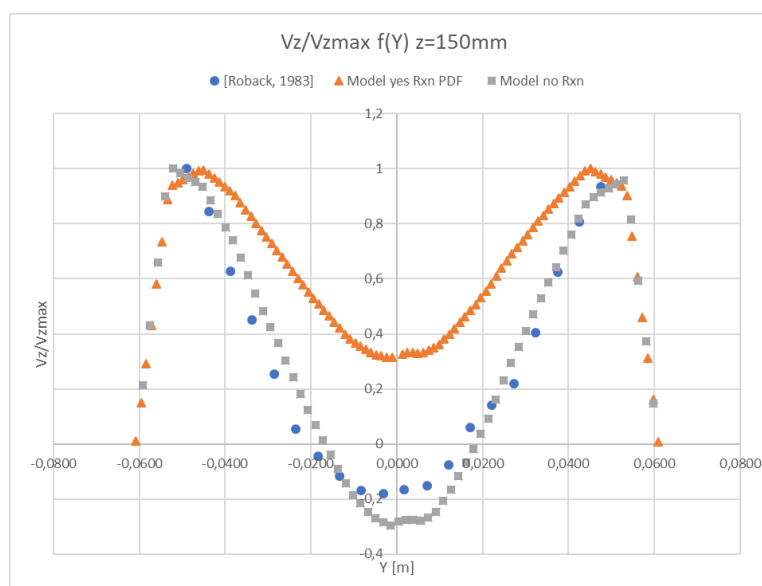
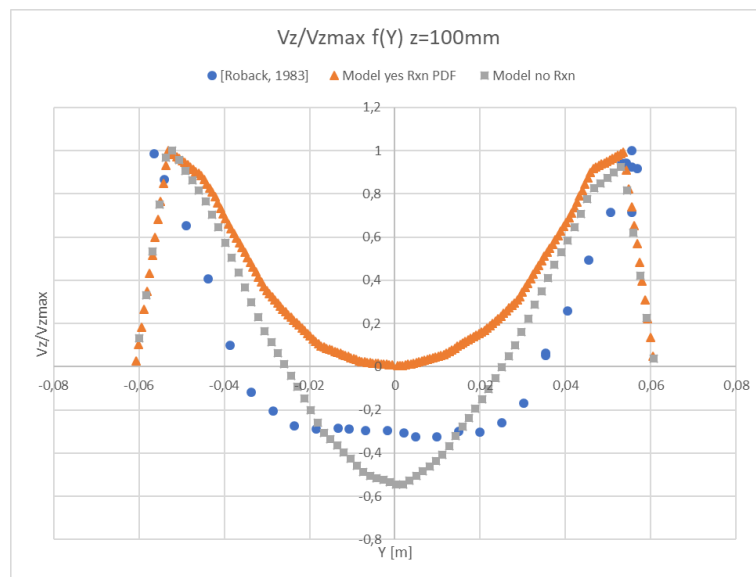
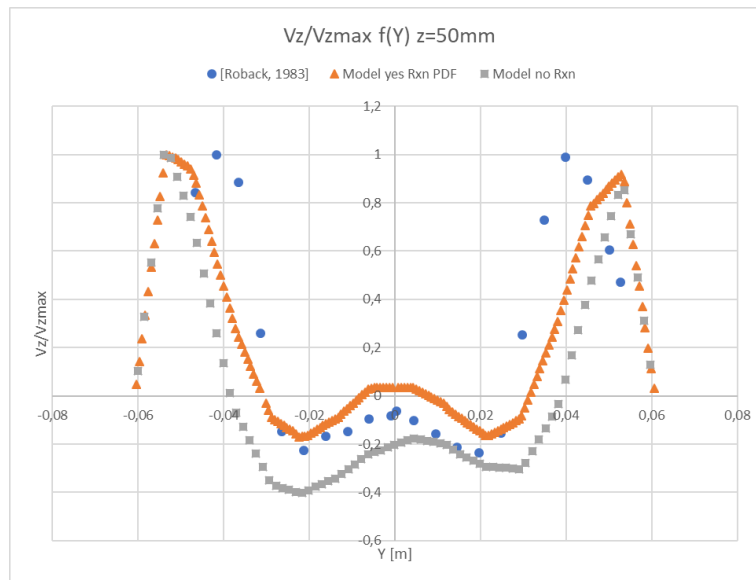


Fig. 6.1. Comparación de las velocidades axiales adimensionales en el eje de la tobera para diferentes valores de número de Swirl, entre los modelos de no reacción, reacción PDF y las medidas experimentales de [Roback, 1983].

A continuación, se analizarán los perfiles radiales de velocidad axial adimensionalizada en diferentes cotas z del eje de la tobera:



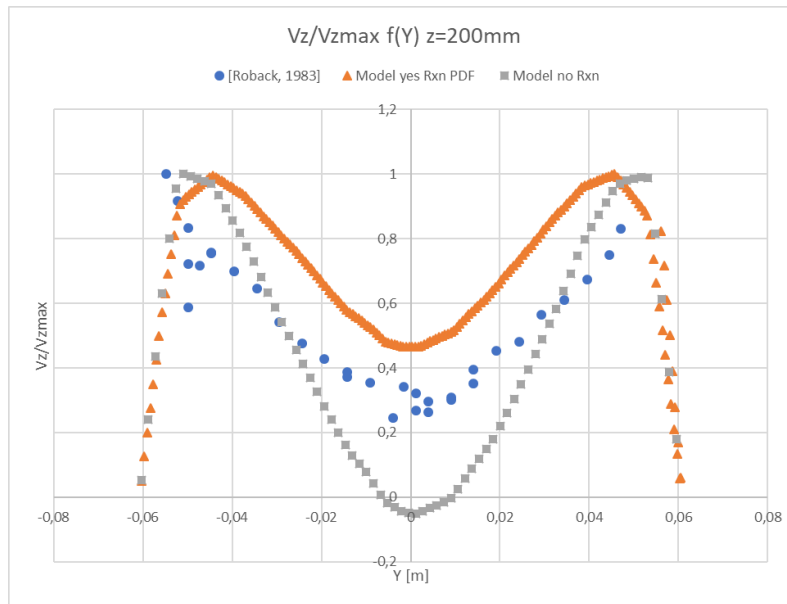


Fig. 6.2. Comparación de velocidades axiales adimensionalizadas en función del radio para diferentes cotas del eje Z de la tobera, entre los modelos de no reacción, reacción PDF y las medidas experimentales de [Roback, 1983].

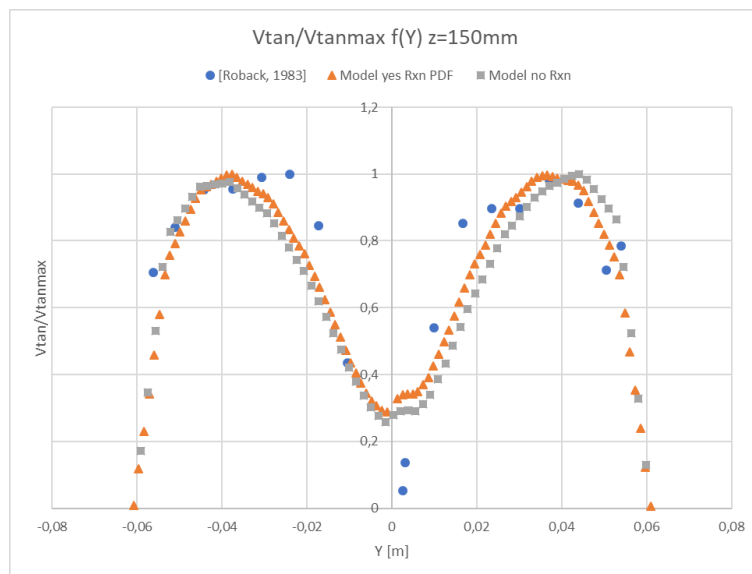
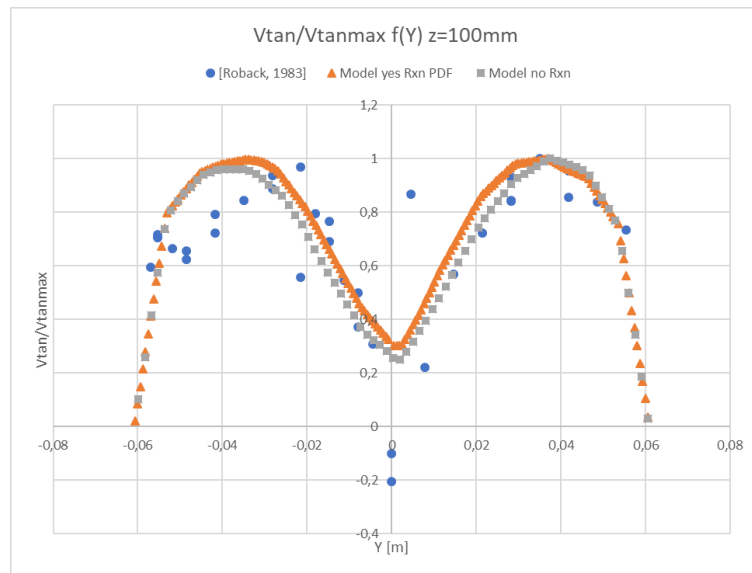
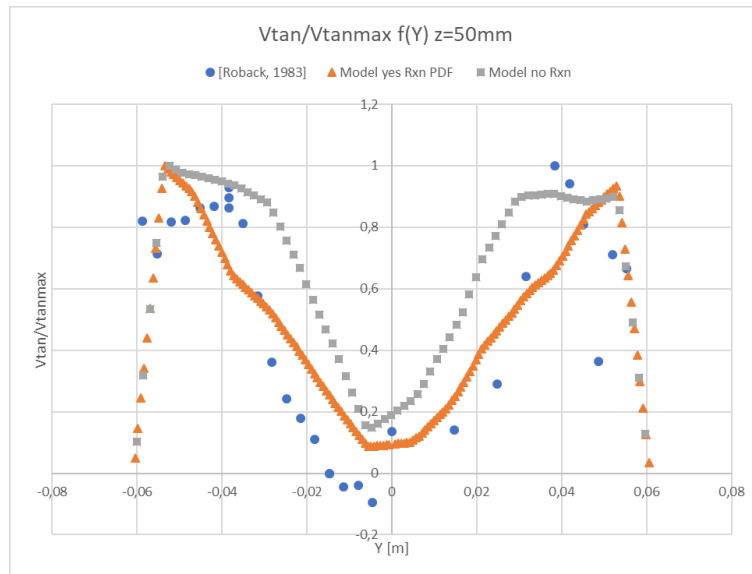
En la Fig. 6.2 se ve que el modelo de no reacción se aproxima bastante bien a los resultados del experimento de [Roback, 1983] en prácticamente todas las secciones. Evidentemente existen diferencias, principalmente asociadas al hecho de que se desconoce el número de Swirl de estos experimentos de [Roback, 1983] (el autor no lo proporciona en su informe).

Puesto que, en líneas generales, las velocidades axiales son mayores en el experimento de [Roback, 1983] que en el modelo de no reacción, solamente se puede realizar una estimación cualitativa del valor de este en los ensayos de estos autores. Únicamente se puede decir que el número de Swirl es menor que el que se tiene en el modelo de no reacción ( $S = 1.6$ ).

A la vista de estos resultados, solo se puede decir que la IRZ se extiende durante una mayor longitud en Z en el modelo de no reacción (en  $Z = 200$  mm todavía se encuentran velocidades negativas en el eje) que en los experimentos de [Roback, 1983] (en  $Z = 200$  mm ya no hay velocidades negativas).

En cuanto al modelo de reacción PDF, se puede ver que, como era de esperar, las velocidades axiales adimensionalizadas obtenidas son mayores tanto en el modelo de no reacción como en los resultados experimentales. Además, se ve que la forma que adquiere la curva se ajusta muy bien a la forma que tiene en los experimentos de estos autores. Incluso, en zonas de cota Z reducida ( $Z = 50$  mm) las velocidades axiales son muy similares, lo que garantiza la semejanza de los experimentos.

A medida que se va avanzando en el eje de la tobera, el modelo PDF se va separando más del experimento de [Roback, 1983] ( $Z = 100$  mm y  $Z = 150$  mm). Además, se ve claramente cómo, mientras que en el modelo PDF ya no existe la IRZ (las velocidades axiales son positivas), en el experimento de [Roback, 1983] ésta aún tarda en desaparecer.





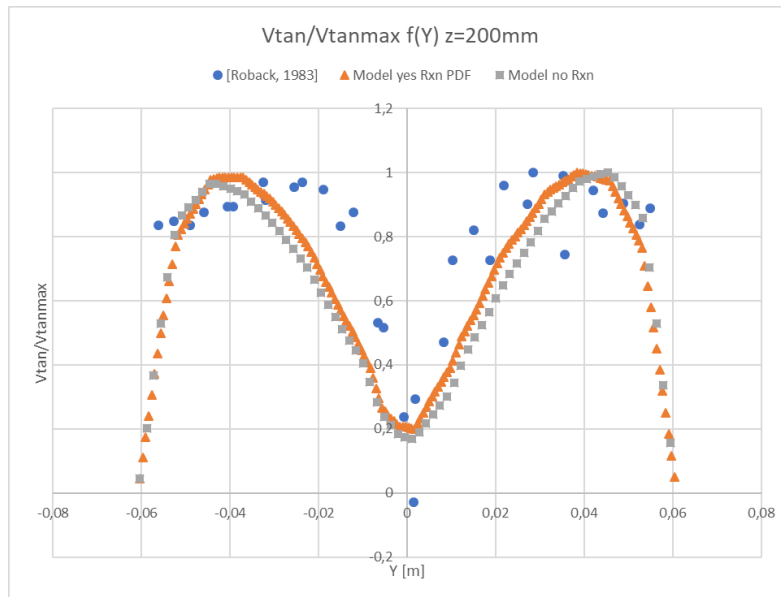


Fig. 6.3. Comparación de velocidades tangenciales adimensionalizadas en función del radio para diferentes cotas del eje Z de la tobera, entre los modelos de no reacción, reacción PDF y las medidas experimentales de [Roback, 1983].

En cuanto a las velocidades tangenciales, se puede ver que son muy similares entre los 3 casos representados, especialmente para las cotas más altas de Z ( $Z = 100$  mm,  $Z = 150$  mm y  $Z = 200$  mm). En cambio, para la cota  $Z = 50$  mm las velocidades difieren más.

Esto es así porque, tal y como se comentó en párrafos anteriores, se desconoce el número de Swirl del ensayo experimental, pero toda evidencia que es menor que el utilizado en los modelos de no reacción y PDF. Por tanto, el efecto de tener un número de Swirl diferente se ve en que las velocidades tangenciales difieren más para cotas cercanas a la descarga, que en zonas más alejadas, donde el flujo se hace más uniforme como consecuencia de la disipación de energía.

### 6.2.2. Especies químicas

El hecho de que las velocidades difieran entre el modelo propuesto y el experimento de [Roback, 1983], así como la extensión de la IRZ, pueden afectar también a la distribución de las especies químicas y, por tanto, también a la reacción.

En la Fig. 6.4 se vuelve a ver que los modelos de no reacción, PDF y el experimento de [Roback, 1983] difieren entre sí. Si se comparan la curva del experimento con  $S = 1.4$  con la del modelo de no reacción ( $S = 1.6$ ) se puede ver claramente como no coincide ni siquiera la forma de la curva.

Se observa que gran parte del  $CH_4$  se desplaza hacia un extremo de la tobera, mientras que hacia el otro extremo la cantidad de  $CH_4$  que existe es más baja, obteniéndose una asimetría. Esto se puede deber al fenómeno del *Vortex Breakdown*, un complejo fenómeno característico de este tipo de quemadores de flujo rotante, que ayuda a la estabilidad de la combustión y fue estudiado en detalle por [Lucca-Negro, 2001]. En cambio, en el experimento de [Roback, 1983] la curva obtenida es simétrica y tiene forma cóncava, con mayor concentración de  $CH_4$  en las paredes de la tobera.

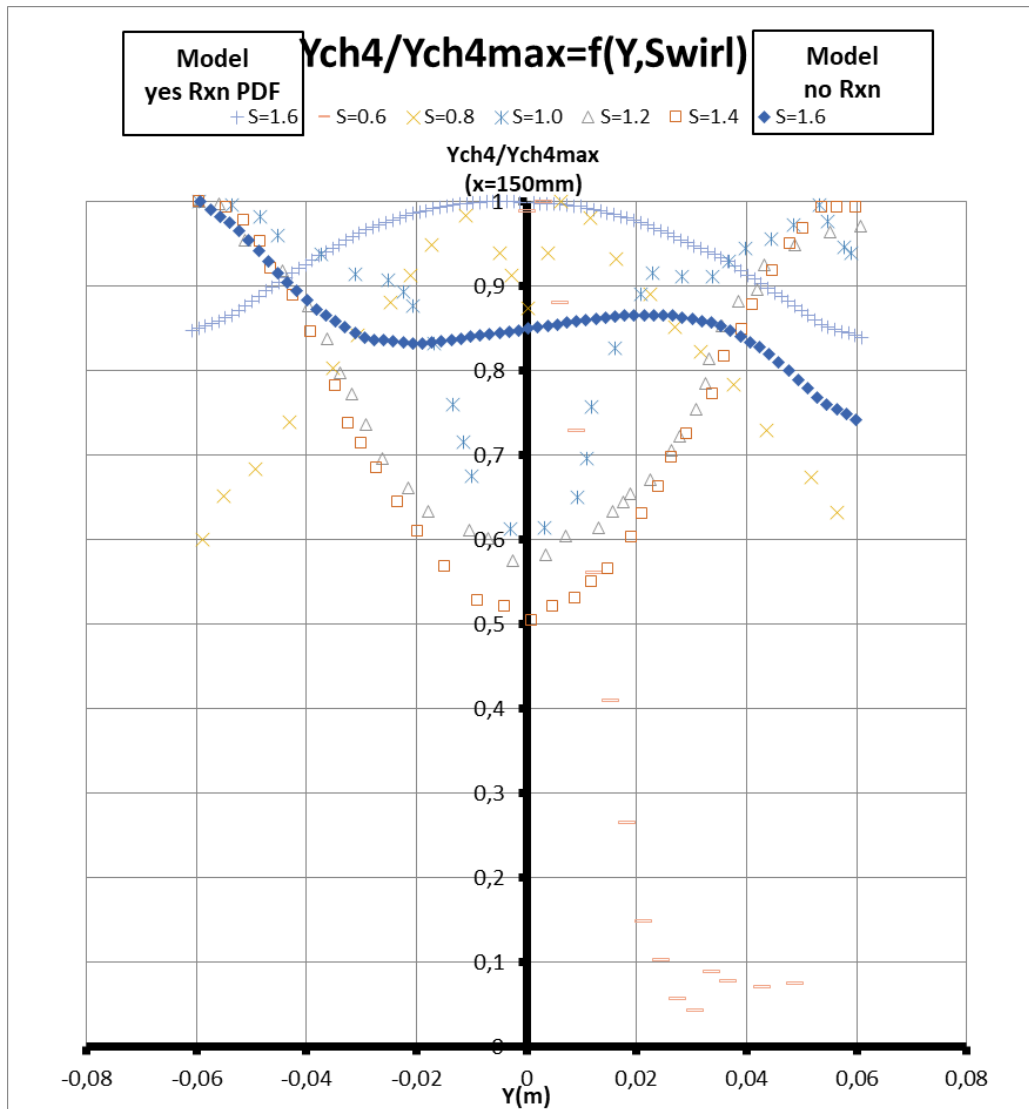


Fig. 6.4. Comparación de fracciones másicas de CH<sub>4</sub> adimensionalizadas en función del radio y del número de Swirl, para una cota Z = 150 mm, entre los modelos de no reacción, reacción PDF y las medidas experimentales de [Roback, 1983].

Por último, en el modelo PDF la forma obtenida de la curva es convexa, es decir, con una mayor concentración de CH<sub>4</sub> en el centro de la tobera. Este comportamiento del modelo propio se asemeja más al del experimento con un número de Swirl bajo (S = 0.8), lo que explica el hecho de que los torbellinos generados en el modelo propio tengan un tamaño más pequeño y por ello se disipen antes.

### 6.3. Janus B., Dreizler A., Janicka J., 2007

Estos autores, realizaron una serie de medidas experimentales en un quemador de flujo swirl con una geometría de descarga diferente a la que se ha venido utilizando en los modelos analizados en los anteriores capítulos. Dicha geometría se presenta en la Fig. 6.5.

Las medidas experimentales las obtienen mediante velocimetría láser Doppler (LDV). Además, cabe destacar que estos autores, puesto que la llama no está confinada, no proporcionan en su estudio un valor de longitud característica, lo que, unido a que las velocidades que emplean son muy elevadas, nos llevará a no poder realizar una buena comparación, por la falta de semejanza geométrica.

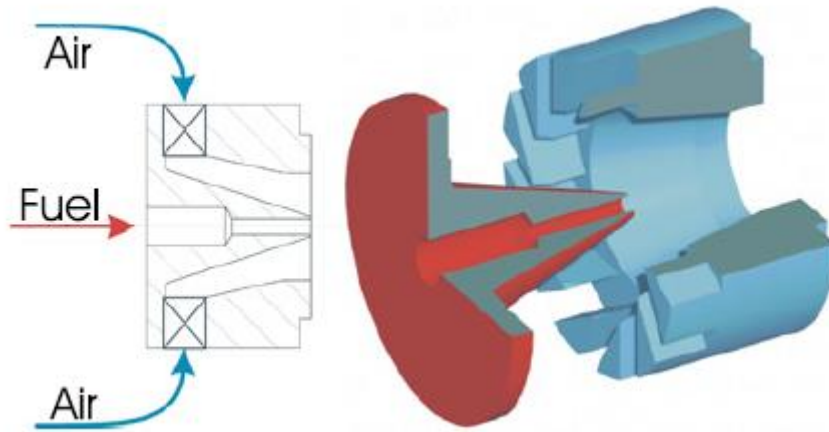


Fig. 6.5. Boceto de la geometría de la descarga al quemador utilizado por [Janus, 2007].

### 6.3.1. Velocidad del flujo

En primer lugar, cabe destacar que en el informe de [Janus, 2007] no se proporciona en ningún momento ningún parámetro de longitud característica. Esto, unido a que los datos de velocidad axial que proporcionan solo aparecen representados hasta una cota axial  $Z = 60 \text{ mm}$ , en la cual aún existe flujo reverso (se encuentra todavía en la IRZ), impiden que se puedan adimensionalizar los valores de longitud axial.

Por ese motivo, resultará complejo comparar el estudio de estos autores con el modelo PDF que se ha planteado en el presente informe. No se podrán comparar la extensión de la IRZ a lo largo del eje  $Z$ , por ejemplo.

En la Fig. 6.6 se observa que las velocidades mínimas alcanzadas en los experimentos de [Janus, 2007] son inferiores a las alcanzadas en el modelo PDF (mayores en valor absoluto). Si se compara este hecho con los números de Swirl (1.2 para el experimento de estos autores y 1.6 para el modelo PDF) y con la información de la Fig. 6.1, se puede observar que coincide con lo mostrado en la Fig. 6.6: Las velocidades axiales mínimas con número de Swirl 1.2 son inferiores a las obtenidas con Swirl 1.6

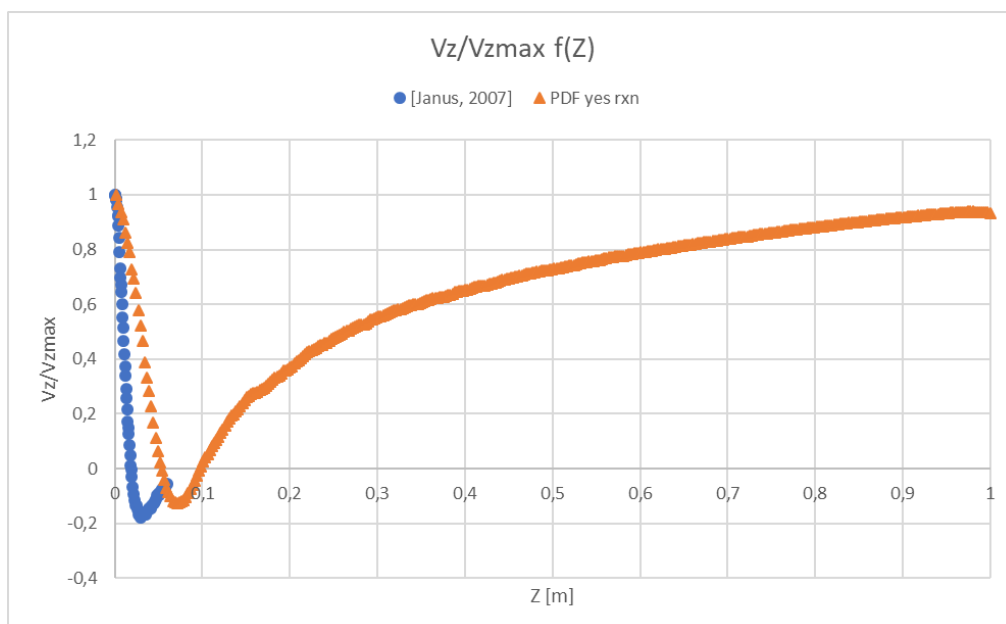


Fig. 6.6. Comparación de velocidades axiales adimensionales en el eje de la tobera entre las medidas experimentales de [Janus, 2007], y el modelo de reacción PDF.

Las siguientes figuras (Fig. 6.7 y Fig. 6.8) adimensionalizan la posición radial dividiendo dicha posición entre el radio exterior de la tobera de descarga anular ( $R_{ext}$ ), de tal forma que la posición  $Y/R_{ext}=1$  se corresponde con el punto más externo de descarga de la tobera anular. La tabla 6.2 resume los valores de  $R_{ext}$  tomados en los 2 casos comparados.

Tabla 6.2. Valores de  $R_{ext}$  (valor con el que se adimensionaliza) para los dos casos comparados en este apartado: [Janus, 2007] y PDF yes rxn

	[Janus, 2007]	PDF yes rxn
$R_{ext}$ [mm]	15	30

En las Fig. 6.7 y 6.8 se puede observar una comparación entre las velocidades axiales adimensionales y tangenciales para las cotas  $Z = 1$  mm y  $Z = 10$  mm entre las medidas experimentales de [Janus, 2007] y el modelo PDF. Puesto que la cota  $Z = 1$  mm está muy cerca de la descarga en ambos casos, a pesar de que no se disponga de una longitud característica para el caso de las medidas experimentales, se puede comparar directamente ambas con facilidad, pues no deberían de variar mucho los resultados. En cambio, puesto que  $Z = 10$  mm está más alejado de la descarga, al no disponer de dicha longitud característica las gráficas obtenidas serán muy diferentes.

En cuanto a las velocidades axiales adimensionales para  $Z = 1$  mm (Fig. 6.7), lo primero que se observa es que, mientras que en los experimentos de [Janus, 2007] la velocidad del comburente (tobera anular) es menor que la del combustible (tobera central), en el modelo PDF ocurre lo contrario. Además, el radio de descarga de la tobera central es mucho mayor en el modelo PDF (0.5 veces el radio exterior de la tobera anular), en el experimento de [Janus, 2007], dicho radio es mucho menor (0.25 veces el radio exterior de la tobera anular).

Tal y como se comentó en párrafos anteriores, las velocidades axiales adimensionales para  $Z = 10$  mm no son comparables entre ambos modelos, y la Fig. 6.7 así lo demuestra.

En cuanto a las velocidades tangenciales para  $Z = 1$  mm (Fig. 6.8) se aprecia que en la zona de la descarga de la tobera anular los perfiles de velocidad se aproximan bastante. No coinciden exactamente porque, tal y como se comentó anteriormente, el radio de la tobera central es más pequeño en el experimento de [Janus, 2007] que en el modelo PDF, lo que hace que el radio interior de la tobera anular sea más pequeño y, consecuentemente, el área de descarga. En cuanto al perfil de velocidades en zona de la tobera central, se observa que, mientras que en el modelo PDF la velocidad tangencial es nula, en el experimento de [Janus, 2007] los valores son ligeramente negativos, debido a la geometría cónica de la tobera anular (ver Fig. 6.5), que hace que el flujo de dicha tobera anular influya más sobre el flujo que sale de la tobera central.

Nuevamente, y tal y como se comentó para la Fig. 6.7, las velocidades tangenciales adimensionales para  $Z = 10$  mm no son comparables entre ambos modelos, y la Fig. 6.8 así lo demuestra. Simplemente comentar respecto a dicha figura, que en la curva del modelo PDF, el salto que se observa en  $Y/R_{ext} = 0$  se debe al cambio de signo de la velocidad tangencial, al tratarse de un flujo antisimétrico.

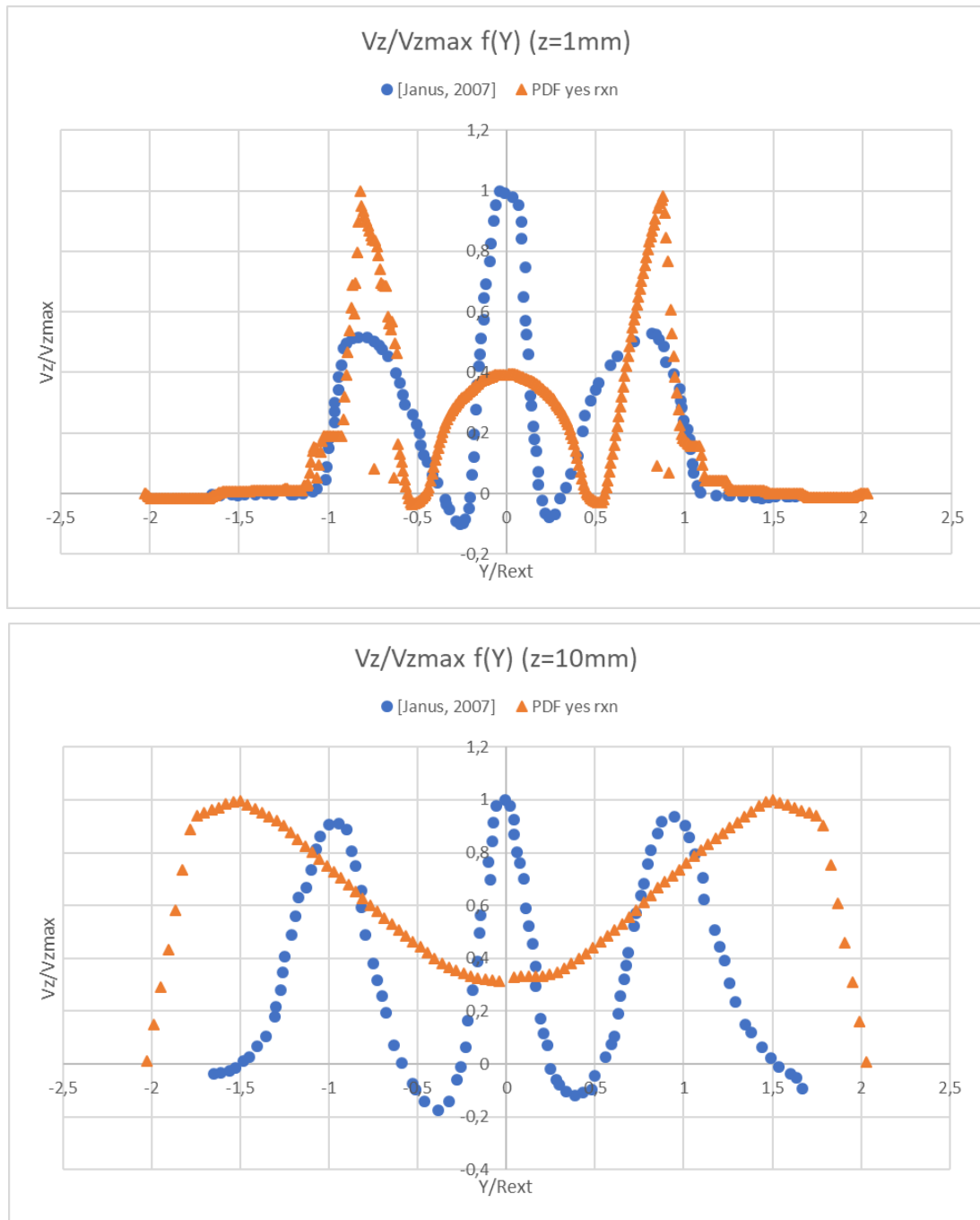


Fig. 6.7. Comparación de velocidades axiales en las cotas  $Z = 1 \text{ mm}$  y  $Z = 10 \text{ mm}$ , entre las medidas experimentales de [Janus, 2007], y el modelo de reacción PDF.

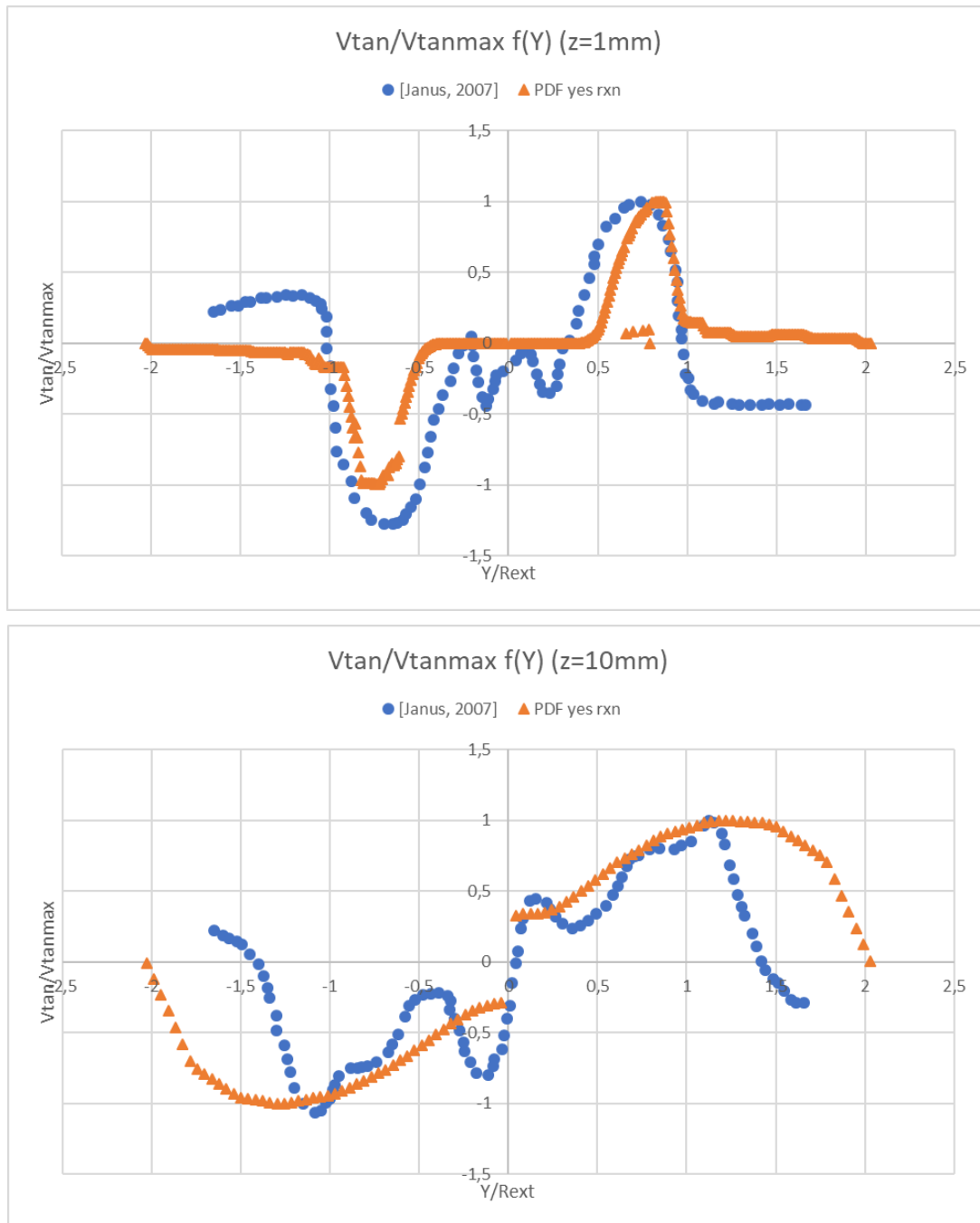


Fig. 6.8. Comparación de velocidades tangenciales en las cotas  $Z = 1 \text{ mm}$  y  $Z = 10 \text{ mm}$ , entre las medidas experimentales de [Janus, 2007], y el modelo de reacción PDF.

#### 6.4. Wegner B., Janus B., Sadiki A., Dreizler A., Janicka J., 2005

Estos autores, en su informe realizaron un estudio del flujo y mezcla (sin reacción), utilizando para ello un modelo numérico de un pequeño inyector swirl utilizado en turbinas de aviones, y lo compararon con medidas experimentales, con el objetivo de validarlos. Además, cabe destacar que ellos utilizaron el modelo de *Large Eddy Simulation* (LES) para el estudio de la turbulencia, en lugar del  $k-\epsilon$  que se utilizó en el modelo PDF.

La geometría que utilizaron para el modelo de estos autores se puede observar en la Fig. 6.9.

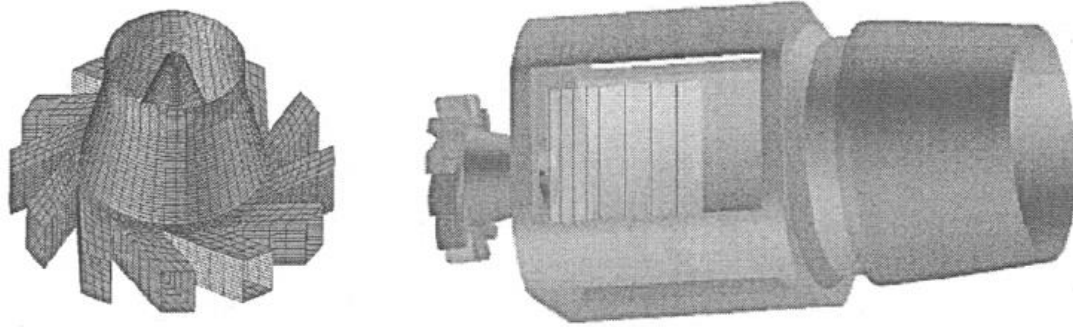


Fig. 6.9. Geometría utilizada por [Wegner, 2005] para su modelo. A la izquierda se encuentra un detalle del generador de swirl, mientras que a la derecha se encuentra el dominio completo estudiado.

Las medidas experimentales fueron obtenidas mediante velocimetría láser Doppler (LDV). Además, al igual que ocurrió en el apartado 6.2, estos autores no proporcionan en su estudio un valor de longitud característica, lo que llevará a no poder realizar una buena comparación entre este modelo y el modelo sin reacción, por la falta de adimensionalización.

#### 6.4.1. Velocidad del flujo

Las gráficas adimensionales que proporciona [Wegner, 2005] en su estudio, al menos en los aspectos que se pretenden estudiar en este apartado, no poseen una escala perfectamente definida, por lo que se vuelve tedioso el hecho de tratar de digitalizar los datos para compararlos con el modelo sin reacción, si bien es cierto que las coordenadas radiales ya las proporcionan adimensionalizadas. Por ese motivo, únicamente se compararán las gráficas en las que se dispone de una escala bien definida, que son las correspondientes a la cota axial  $Z = 1 \text{ mm}$ .

La tabla 6.3 presenta los valores con los que se han adimensionalizado las posiciones radiales de las Fig. 6.10 y 6.11 en los dos modelos comparados en este apartado. En este caso, el valor elegido ha sido el radio de la cámara de combustión ( $R_{cc}$ ), cuyo valor no ha sido proporcionado en el informe de [Wegner, 2005], las posiciones radiales ya las proporcionaba adimensionalizadas. El valor de  $R_{cc}$  está claro en el modelo “no rxn”, por tratarse de flujo confinado. Sin embargo, en el modelo de [Wegner, 2005] se ha definido como  $R_{cc}$  el radio de la tobera de descarga, por tratarse de flujo no confinado y no existir una cámara de combustión propiamente dicha.

Tabla 6.3. Valores de  $R_{cc}$  (valor con el que se adimensionaliza) para los dos modelos comparados en este apartado: [Wegner, 2005] y no rxn

	[Wegner, 2005]	no rxn
$R_{cc} \text{ [mm]}$	Valor no proporcionado por el autor	60

Al igual que se comentó en el apartado anterior, en la Fig. 6.10 se vuelve a observar que, mientras que en los resultados del modelo de [Wegner, 2005] la velocidad de descarga de la tobera central es más alta que en la tobera anular, en el modelo de no reacción ocurre lo contrario. Este hecho viene asociado, principalmente, a que en el modelo de [Wegner, 2005], la sección de descarga del combustible es muy pequeña en comparación a la de la tobera anular, generando una mayor velocidad de descarga a pesar de tener un gasto de combustible bajo.

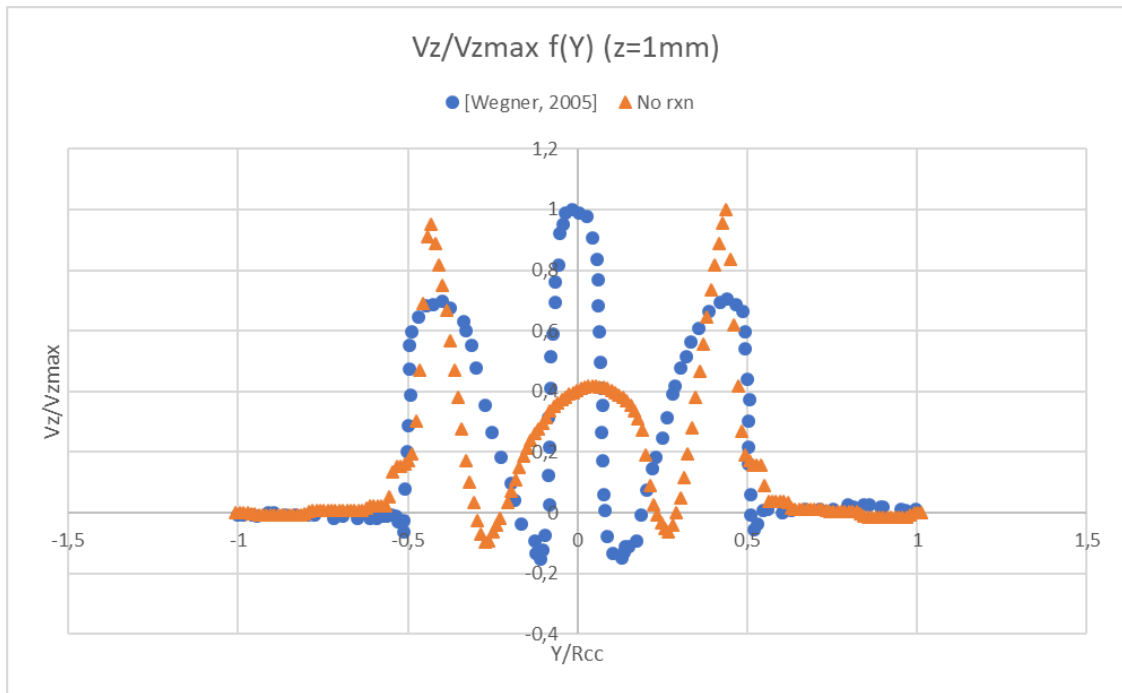


Fig. 6.10. Comparación de velocidades axiales adimensionalizadas en las cotas  $Z = 1$  mm, entre los resultados del modelo de [Wegner, 2005], y el modelo de no reacción.

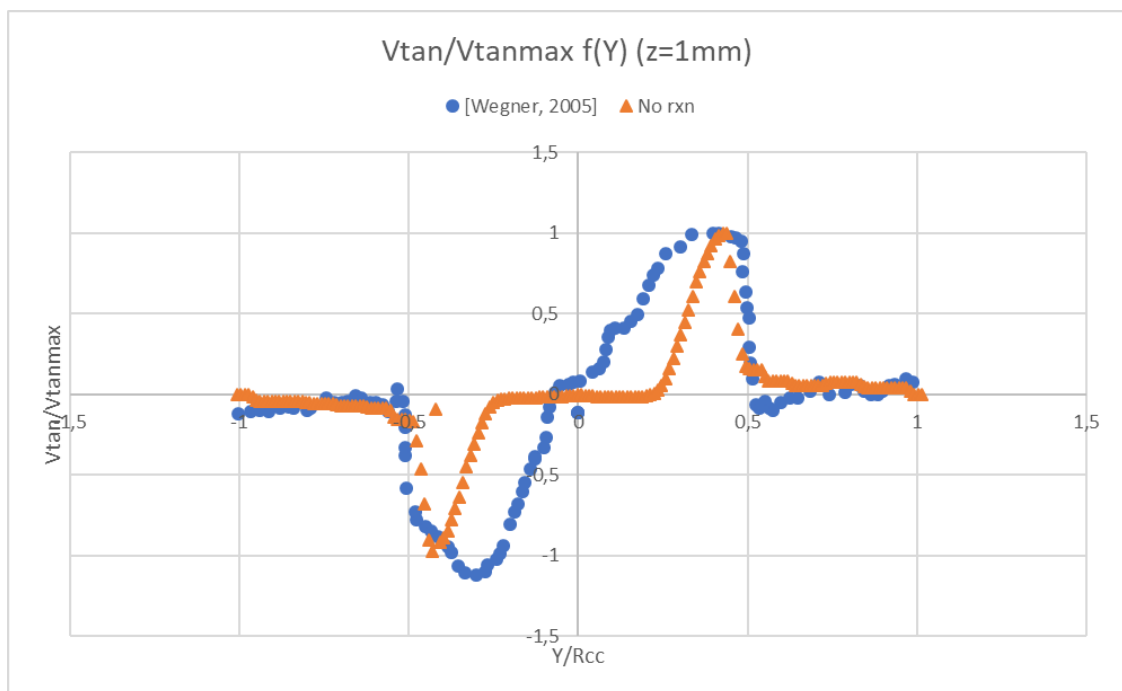


Fig. 6.11. Comparación de velocidades tangenciales adimensionalizadas en las cotas  $Z = 1$  mm, entre los resultados del modelo de [Wegner, 2005], y el modelo de no reacción.

Precisamente esta velocidad tangencial alta de descarga de la tobera central produce un flujo reverso en  $Y/D \approx 0.15$  (pared exterior de la tobera central e interior de la anular), como consecuencia de las turbulencias generadas por la diferencia de velocidades entre la descarga de la tobera central y la anular. Dicho flujo reverso hace que parte del combustible entre dentro de la tobera anular, pudiéndose producir un fenómeno de *flashback*.

En cuanto a la Fig. 6.11 poco más se puede añadir respecto a lo comentado en el apartado anterior para la Fig. 6.8 ( $Z = 1$  mm). Ambas gráficas se aproximan bastante en la zona de la tobera anular. En cambio, en la tobera central, la geometría cónica



de la tobera anular hace que la descarga de la tobera central se vea más afectada por la componente tangencial de la velocidad en el modelo de [Wegner, 2005] que en el modelo de no reacción, obteniéndose valores de velocidad prácticamente nulos en el modelo de no reacción y distintos de cero en el modelo de estos autores.

## 6.5. Meier W., Keck O., Noll B., Kunz O., Stricker W., 2000

El modelo creado por estos autores se trata de un modelo de flujo premezclado no confinado, a diferencia de cualquiera de los modelos propuestos en este proyecto. El objetivo de este apartado es comparar ambos modelos y ver qué similitudes y diferencias tienen.

La Fig., 6.12 muestra el modelo creado por [Meier, 2000]. En dicha figura, la zona de color rojo se trata de unos bloques móviles que permiten cambiar la inclinación de los álabes que generan la componente tangencial de la velocidad y, por tanto, variar el número de swirl. Sin embargo, para el caso que se va a comparar en este apartado, dichos álabes permanecen fijos, pues no es objetivo de estudio, con un valor de número de swirl  $S = 0.75$ .

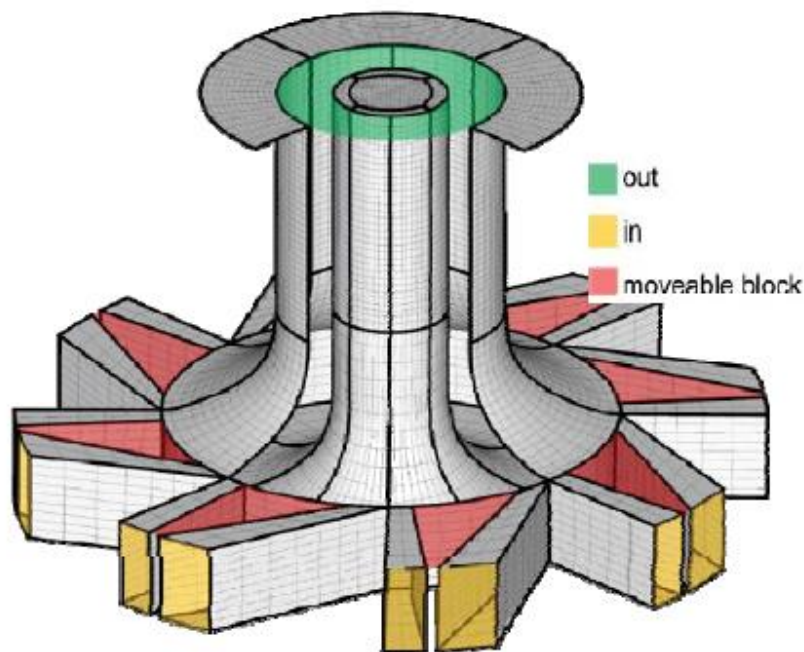


Fig. 6.12. Geometría utilizada por [Meier, 2000] en su estudio. La zona de color amarillo se trata de la entrada de combustible y comburente al quemador; la verde es la salida a la cámara de combustión; y la roja se trata de unos bloques móviles.

### 6.5.1. Velocidad del flujo

Para el estudio de los perfiles de velocidad, se realizará una comparación entre los perfiles radiales de velocidades axiales y tangenciales adimensionalizadas para los modelos de combustión y de mezcla sin combustión, para distintas cotas del eje Z.

La tabla 6.4 muestra los valores entre los que se han dividido las posiciones radiales en las Fig. 6.13, Fig. 6.14, Fig. 6.15, Fig. 6.16 y Fig. 6.17 para adimensionalizarlas. Dicho valor se trata del radio exterior de la tobera de descarga anular ( $R_{ext}$ , valor similar al utilizado en el apartado 6.3).

Tabla 6.4. Valores de  $R_{ext}$  (valor con el que se adimensionaliza) para los dos modelos comparados en este apartado: [Meier, 2000] y no rxn

	[Meier, 2000]	no rxn, PDF yes rxn
$R_{ext}$ [mm]	30	30

Debido a esta adimensionalización, el valor máximo de  $Y/R_{ext}$  en los modelos “no rxn” y “PDF yes rxn” será 2, puesto que se trata de flujo confinado y este es el valor que corresponde a la pared física de la cámara de combustión en el modelo. En cambio, en los resultados de [Meier, 2000]  $Y/R_{ext}$  no tiene un límite físico, ya que el flujo no está confinado.

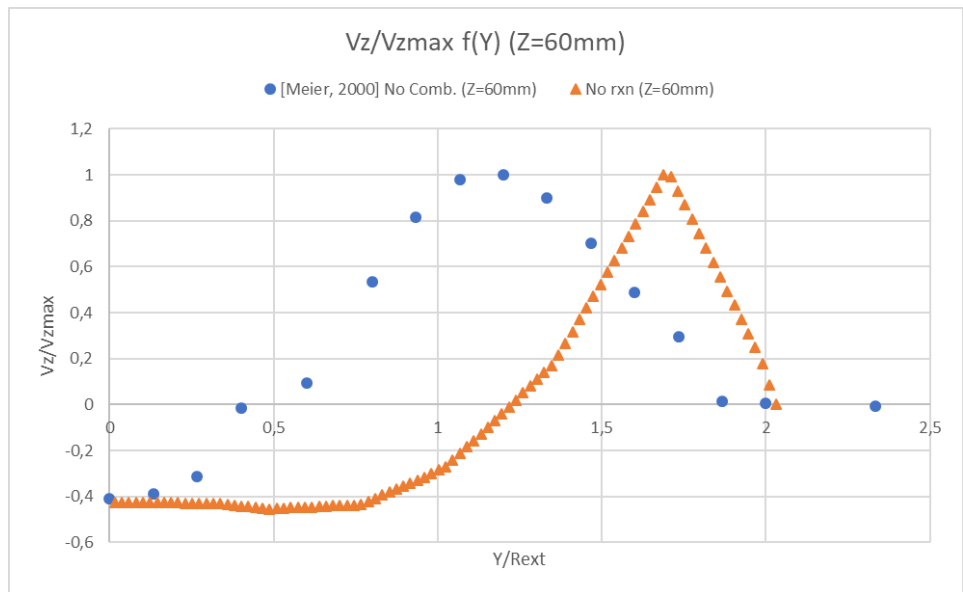
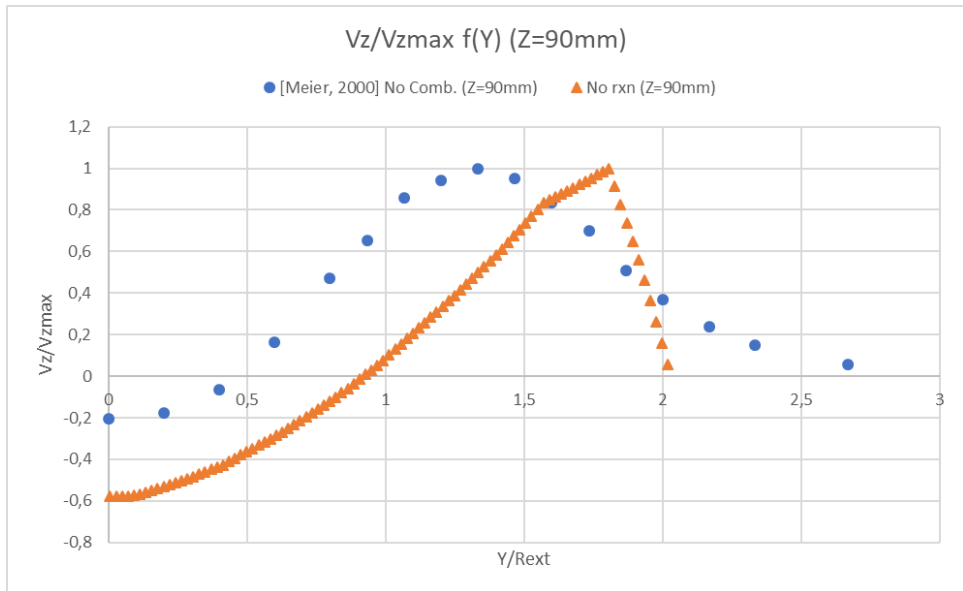
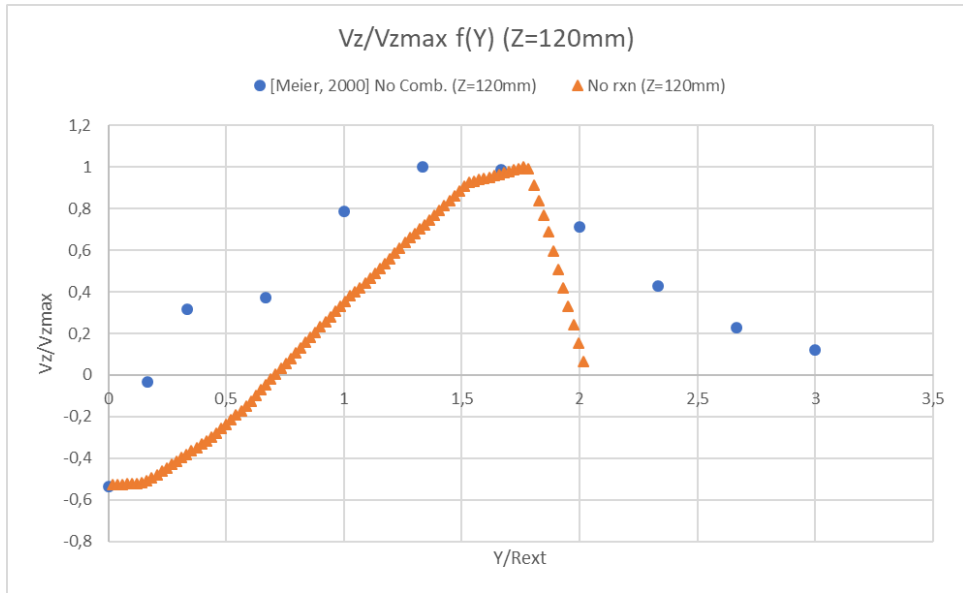
A la vista de los resultados de la Fig. 6.13, se puede observar que las velocidades axiales no se parecen en nada, especialmente en cotas bajas del eje Z, donde es más apreciable el hecho de que en el modelo de [Meier, 2000] no existe flujo en la tobera central.

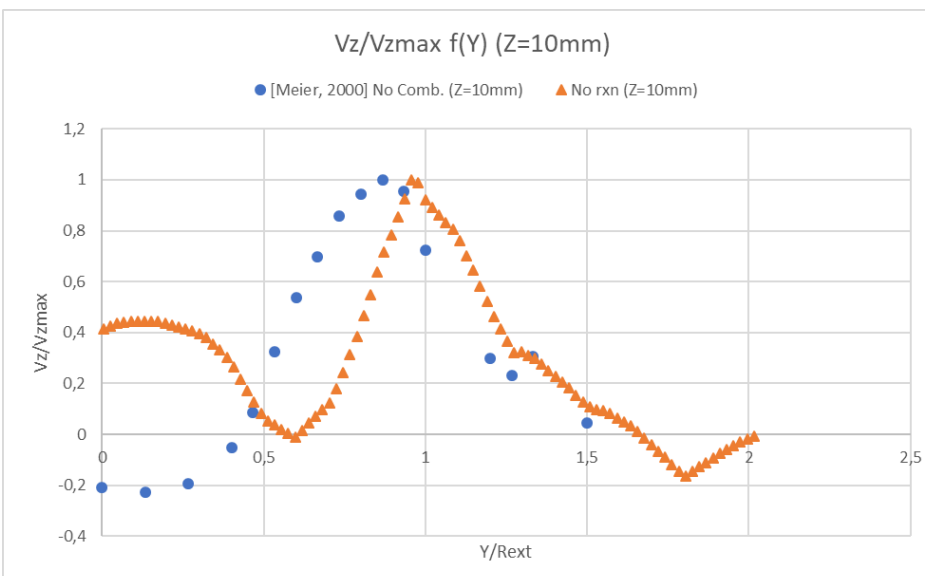
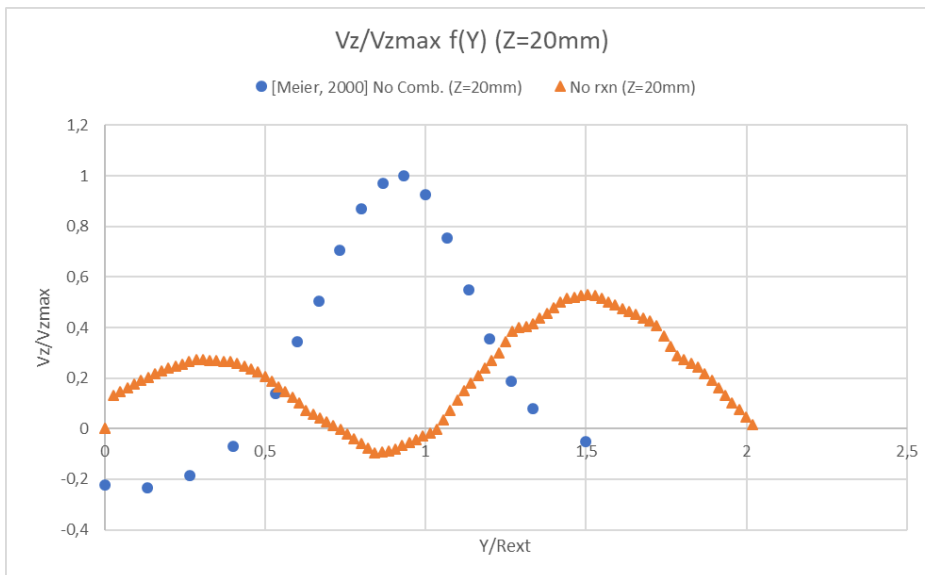
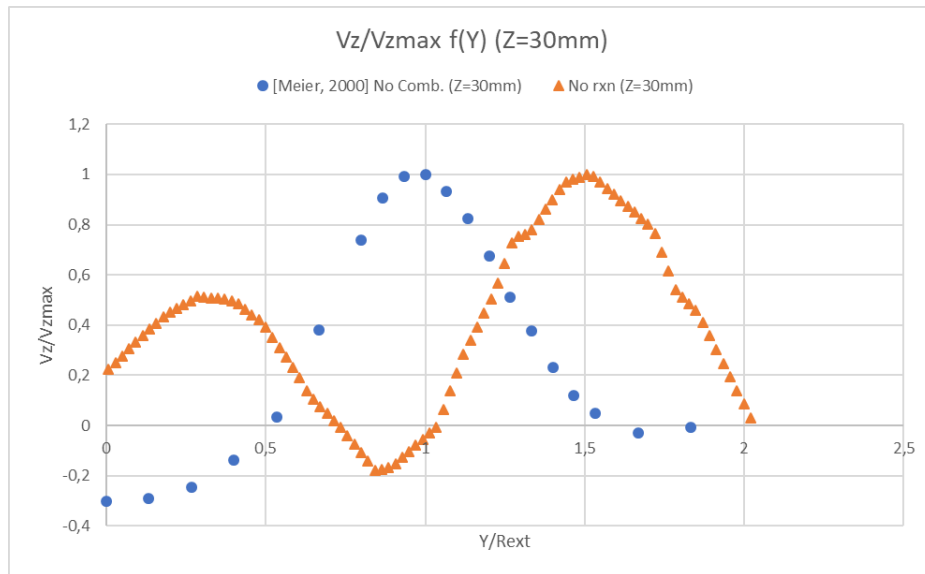
En cotas bajas de Z, en el modelo de no reacción todavía no se ha formado la IRZ. No es hasta la cota  $Z = 60$  mm cuando se empiezan a observar velocidades negativas en el eje de la tobera. En cambio, en el modelo de [Meier, 2000] la IRZ se forma en el instante en el que se produce la descarga por la tobera anular, pues ya para cotas  $Z = 1$  mm ó  $Z = 10$  mm se pueden observar velocidades negativas.

En cotas más altas de Z el flujo comienza a estabilizarse y ambos modelos comienzan a coincidir. Puesto que no se disponen de datos para cotas Z superiores a 120 mm, no es posible realizar una mayor comparación.

Si se observan las velocidades tangenciales adimensionalizadas en la Fig. 6.14, podemos observar una tendencia similar a lo visto en la Fig. 6.13 con las velocidades axiales, pero con una excepción. Para la cota  $Z = 1$  mm los perfiles de velocidad tangencial son muy similares puesto que en ambos modelos el único generador de flujo swirl (componente tangencial) se encuentra en la tobera anular, por lo que es lógico pensar que justo en la descarga ambos perfiles sean similares.

A medida que se avanza en el eje Z, los perfiles de velocidad tangencial tienden a separarse por el hecho de no existir un flujo por la tobera central en el modelo de [Meier, 2000], para finalmente volver a aproximarse ambos perfiles para cotas altas del eje ( $Z = 120$  mm), como consecuencia de la estabilización del flujo.





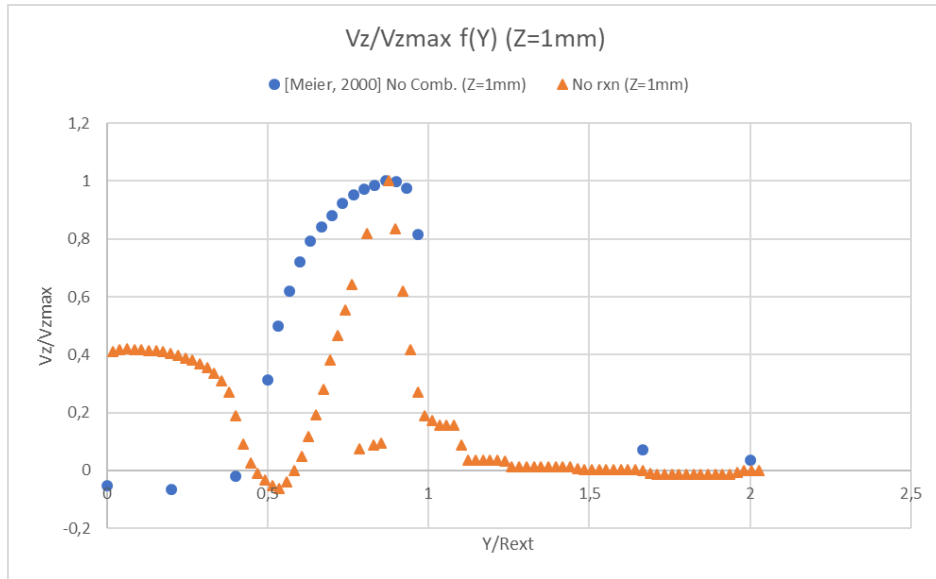
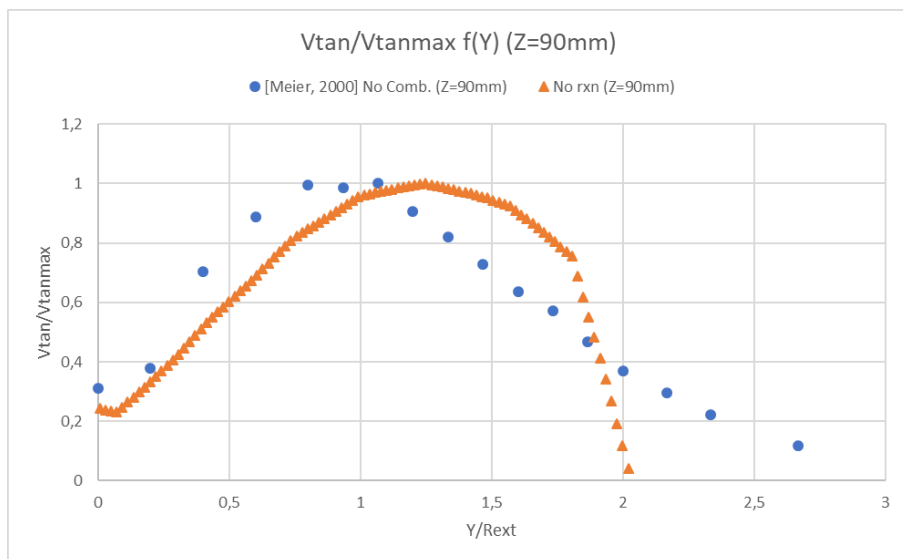
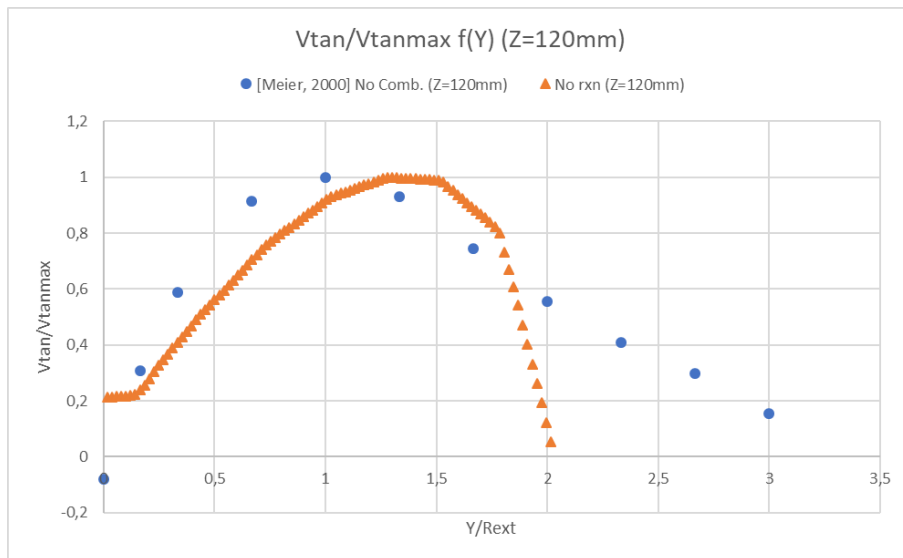
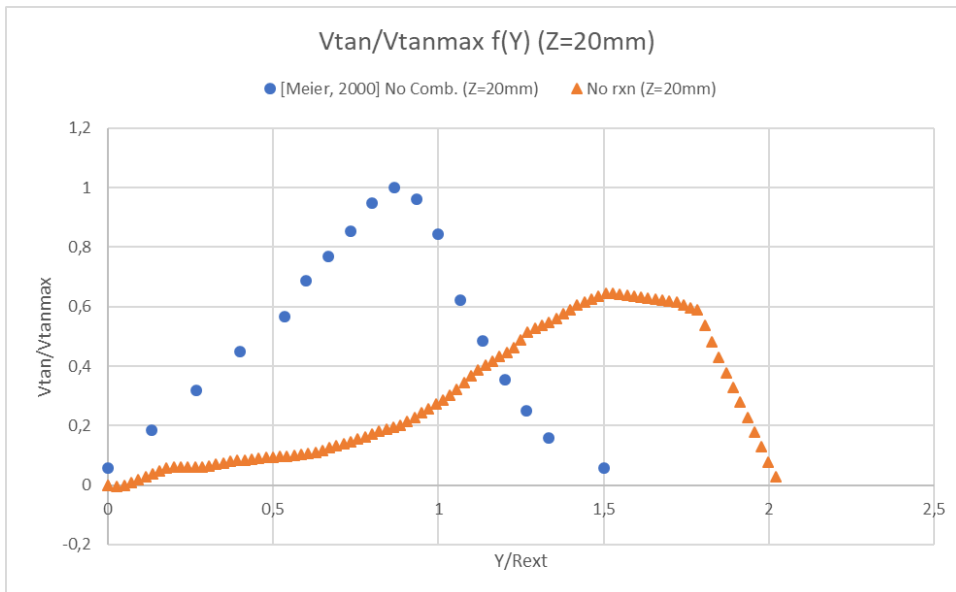
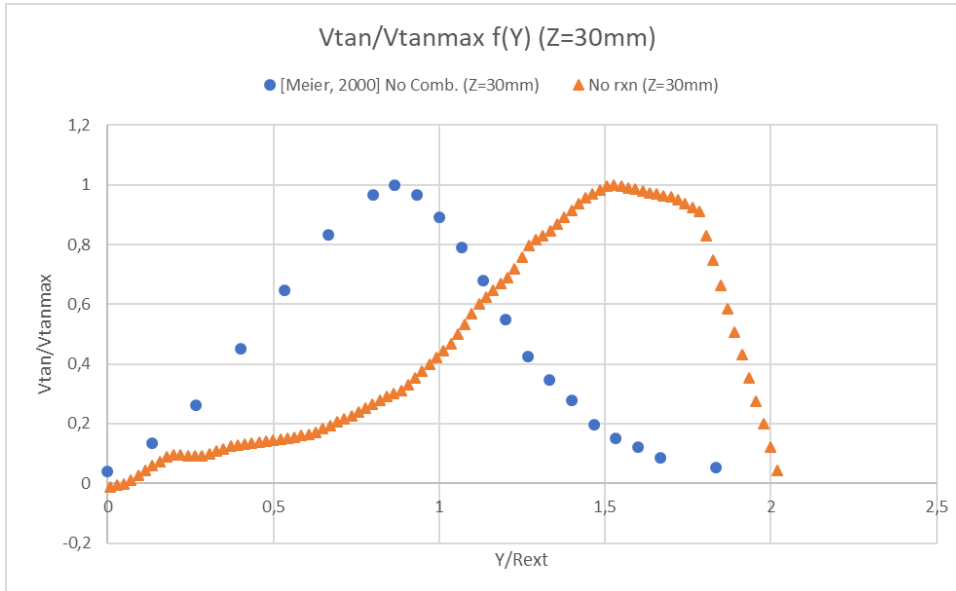
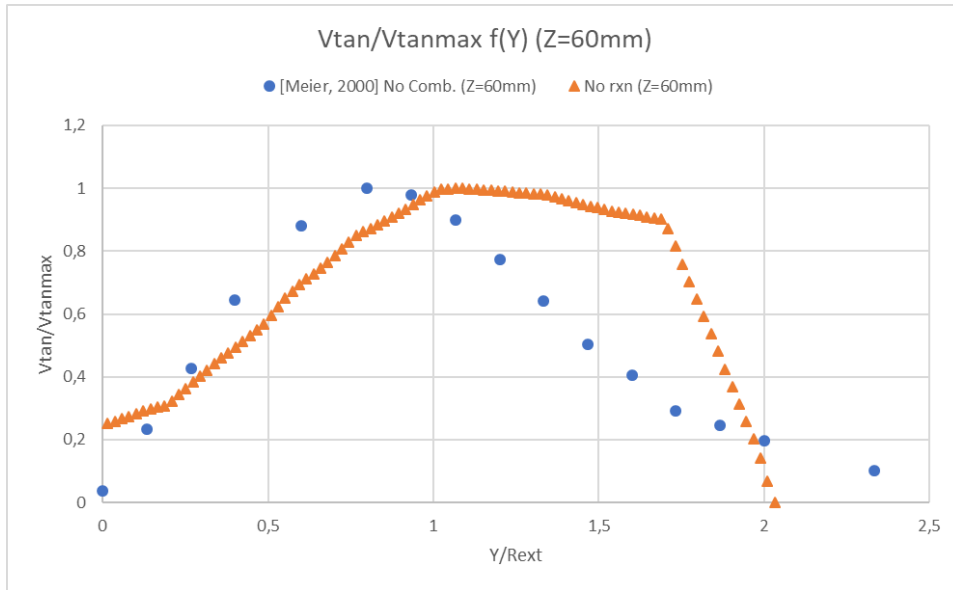


Fig. 6.13. Comparación de velocidades axiales en las cotas  $Z = 1\text{ mm}$ ,  $Z = 10\text{ mm}$ ,  $Z = 20\text{ mm}$ ,  $Z = 30\text{ mm}$ ,  $Z = 60\text{ mm}$ ,  $Z = 90\text{ mm}$ ,  $Z = 120\text{ mm}$ , entre los resultados del modelo de mezcla de [Meier, 2000], y el modelo de no reacción.





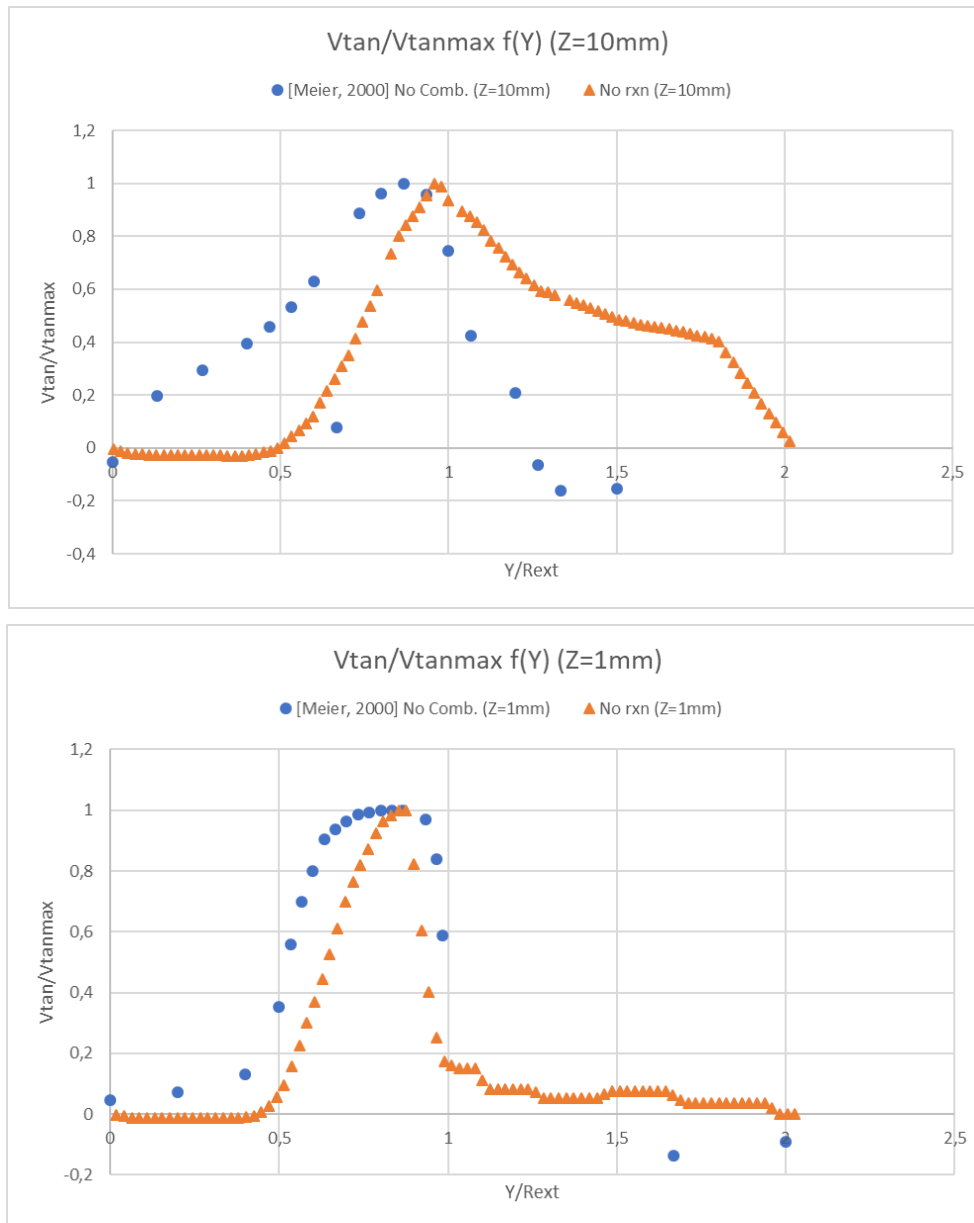
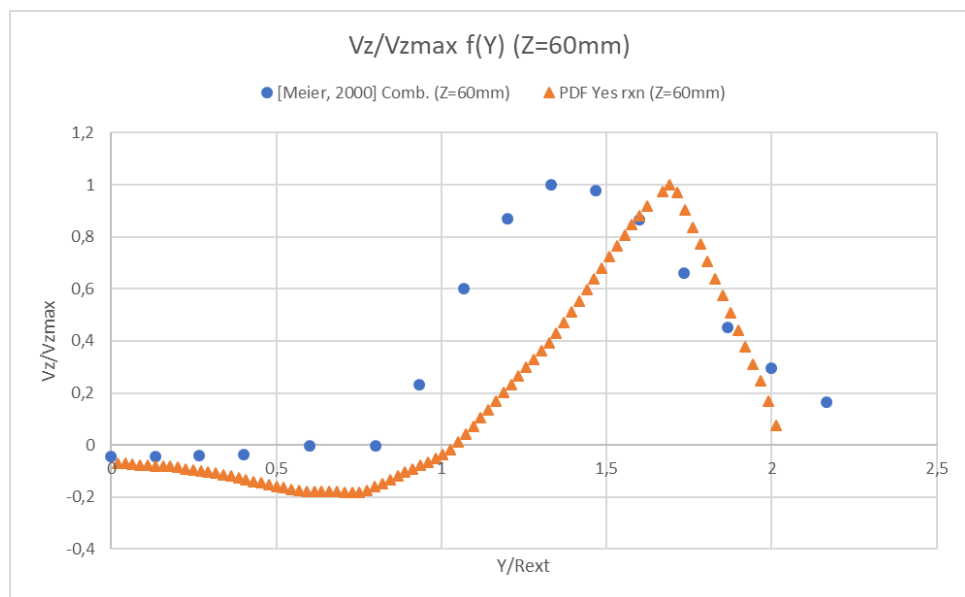
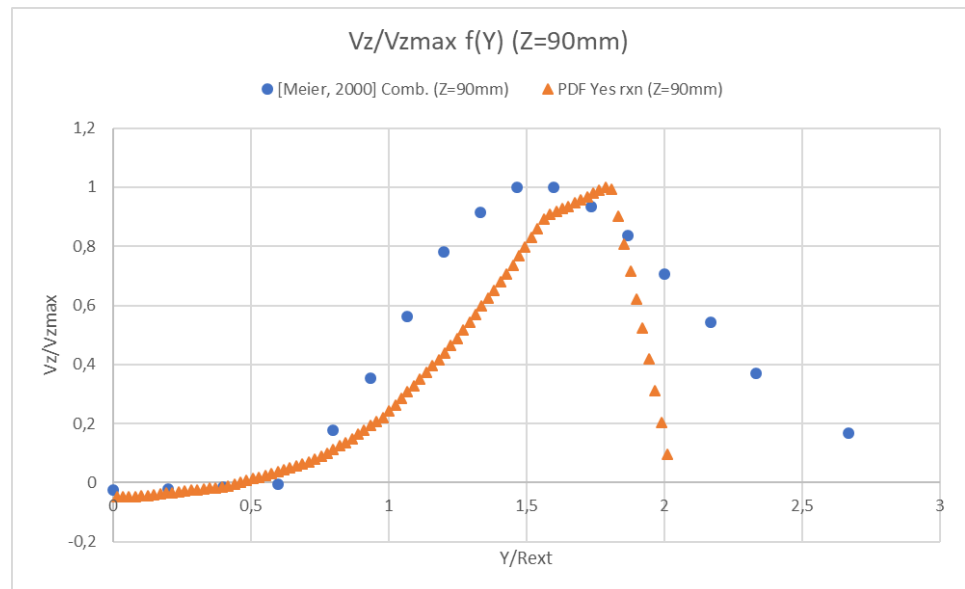
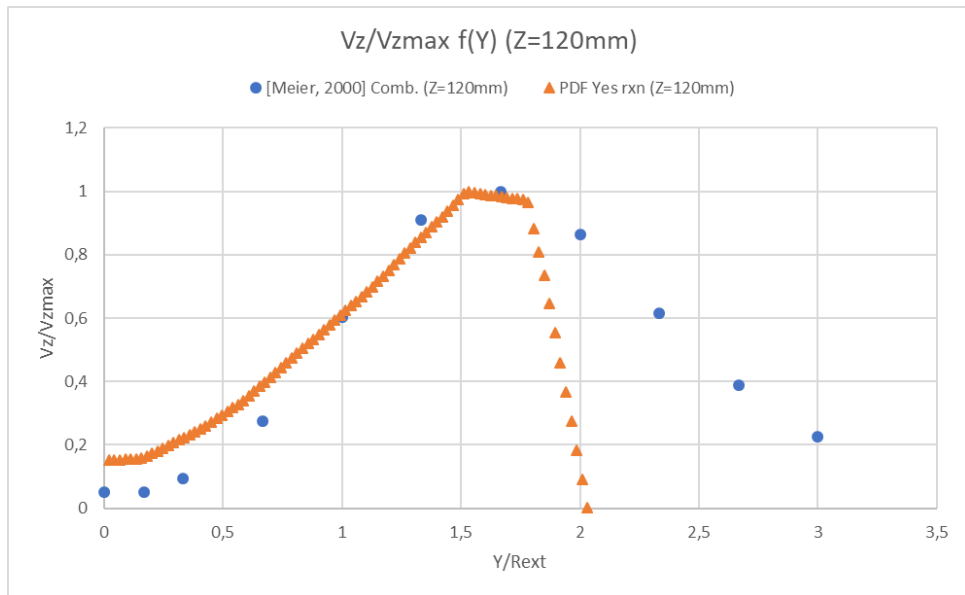


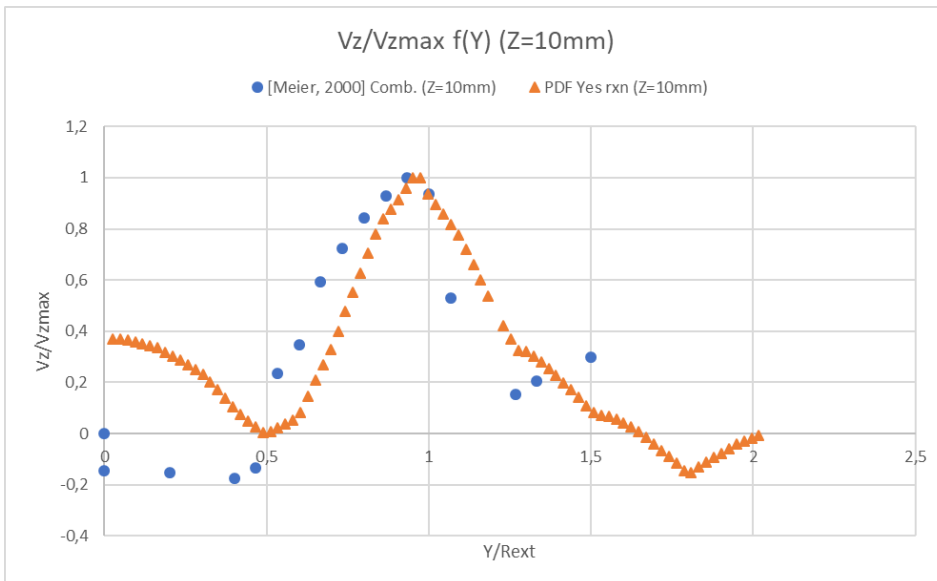
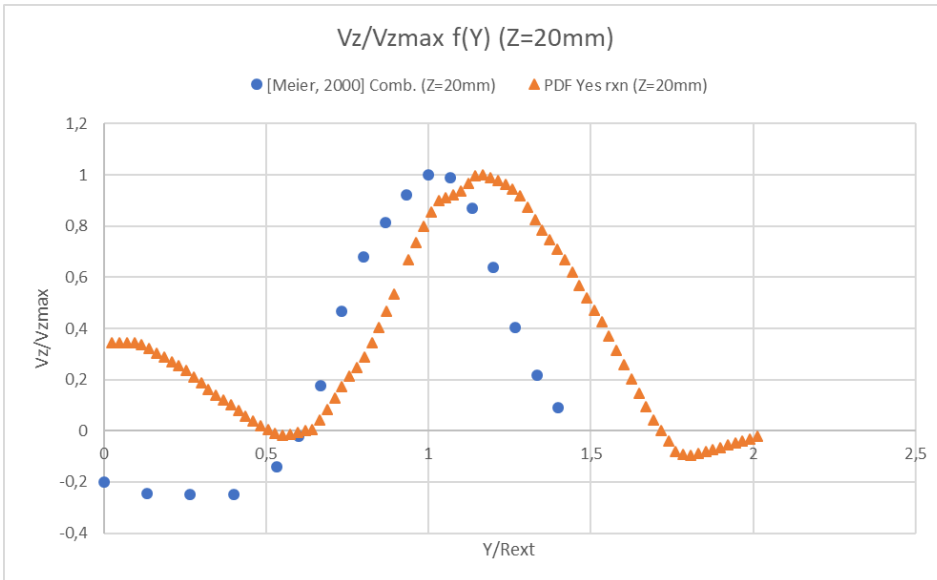
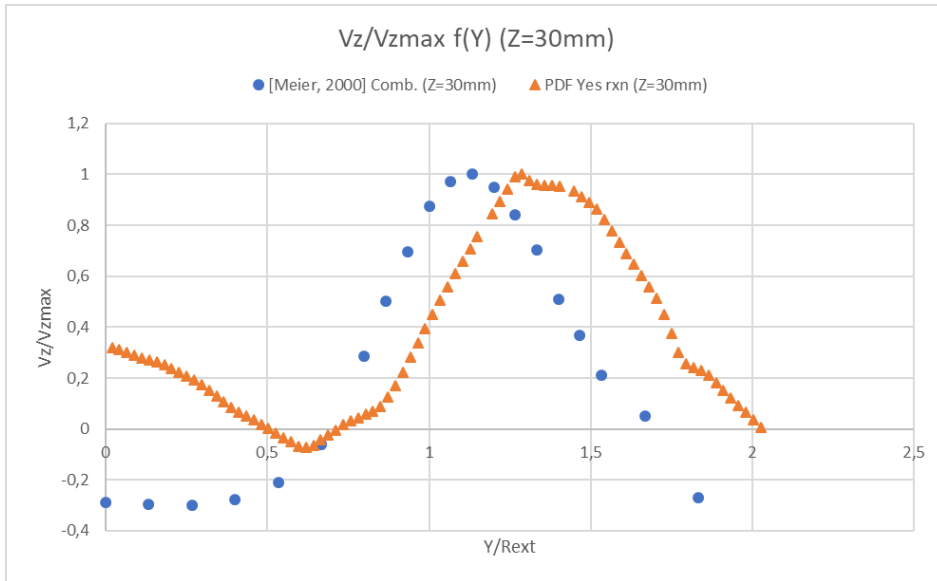
Fig. 6.14. Comparación de velocidades tangenciales adimensionalizadas en las cotas  $Z = 1 \text{ mm}$ ,  $Z = 10 \text{ mm}$ ,  $Z = 20 \text{ mm}$ ,  $Z = 30 \text{ mm}$ ,  $Z = 60 \text{ mm}$ ,  $Z = 90 \text{ mm}$ ,  $Z = 120 \text{ mm}$ , entre los resultados del modelo de mezcla de [Meier, 2000], y el modelo de no reacción.

En la Fig. 6.15 se observa que, si bien los perfiles de velocidad axial adimensionalizada en la zona de la tobera central ( $Y/R_{ext} < 0.5$ ) no se parecen, por lo comentado anteriormente, para zonas más alejadas de la tobera central, dichos perfiles se aproximan más cuando existe combustión que cuando no existe. Incluso se puede observar que para las cotas  $Z = 60 \text{ mm}$  y  $Z = 120 \text{ mm}$  los perfiles son muy similares entre el modelo PDF de reacción y el modelo de [Meier, 2000] con combustión. Evidentemente hay que tener en cuenta que el perfil de velocidades se corta en  $Y/R_{ext} = 2$  en el modelo PDF puesto que se trata de una llama confinada, mientras que [Meier, 2000] crearon un modelo de llama no confinada, motivo por el cual el eje de abscisas es variable en las distintas cotas de la Fig. 6.14.

Para el caso de las velocidades tangenciales (Fig. 6.16), se puede observar un comportamiento similar al que se observó con el modelo de no reacción (Fig. 6.14), aunque en este caso, al tratarse de modelos con reacción, se puede ver cómo ambos modelos se aproximan aún más que cuando solamente existía mezcla.







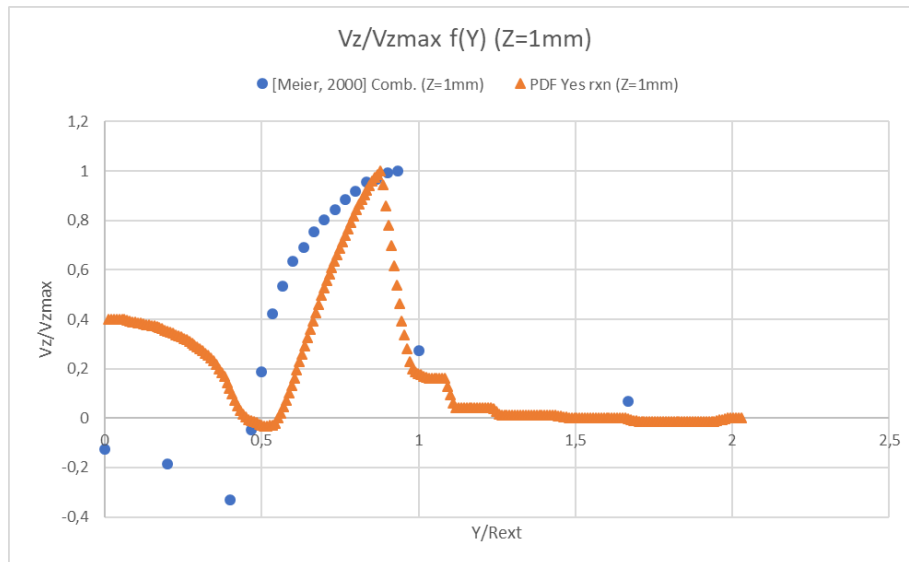
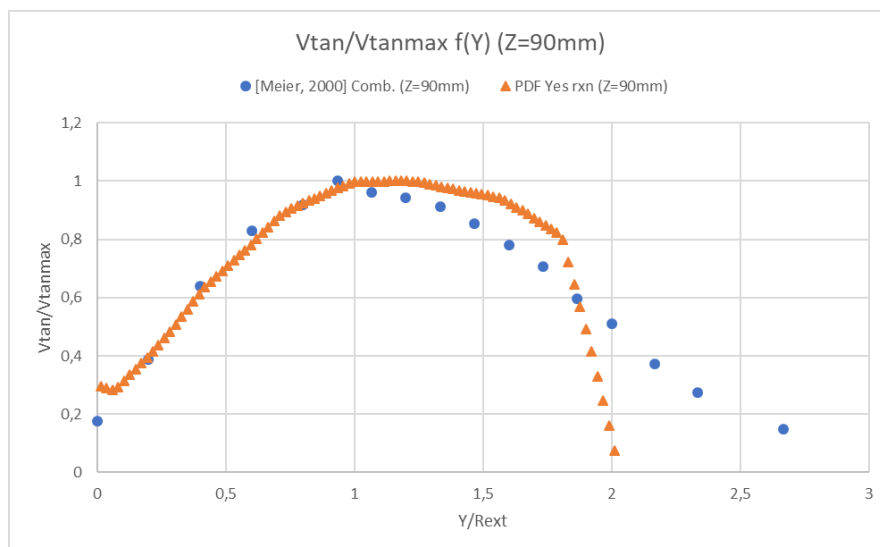
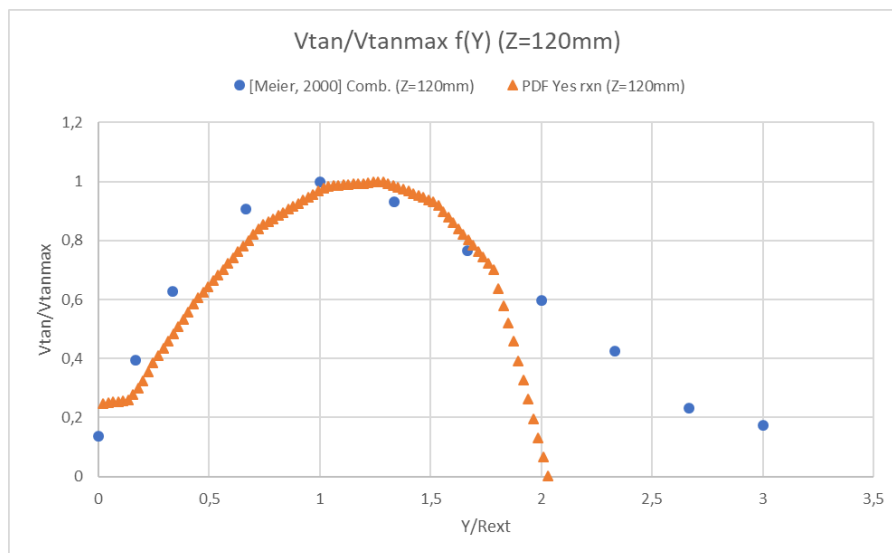
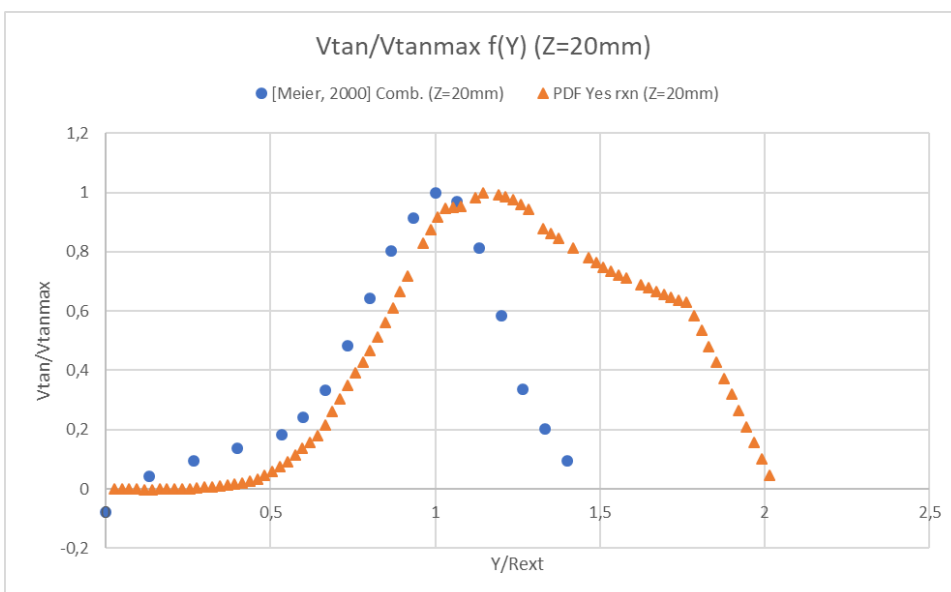
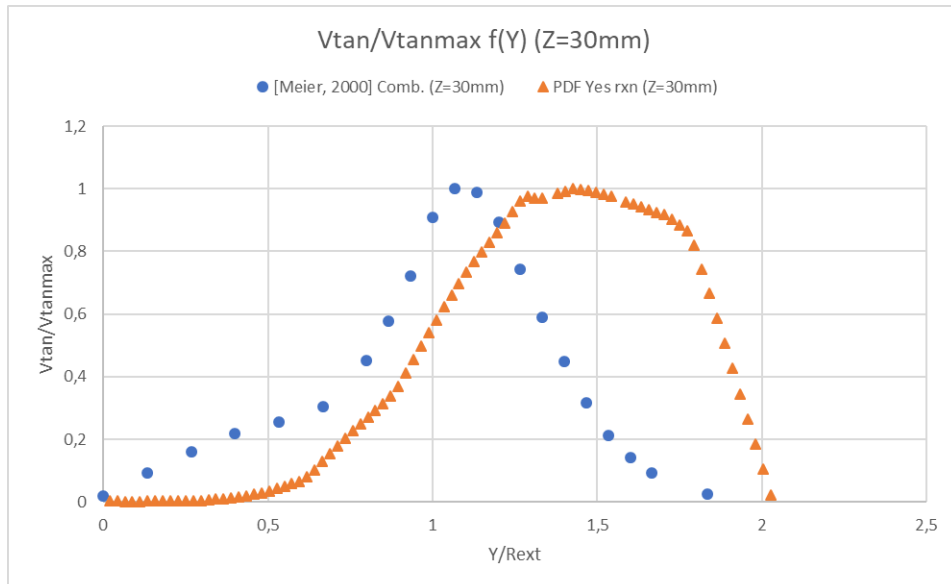
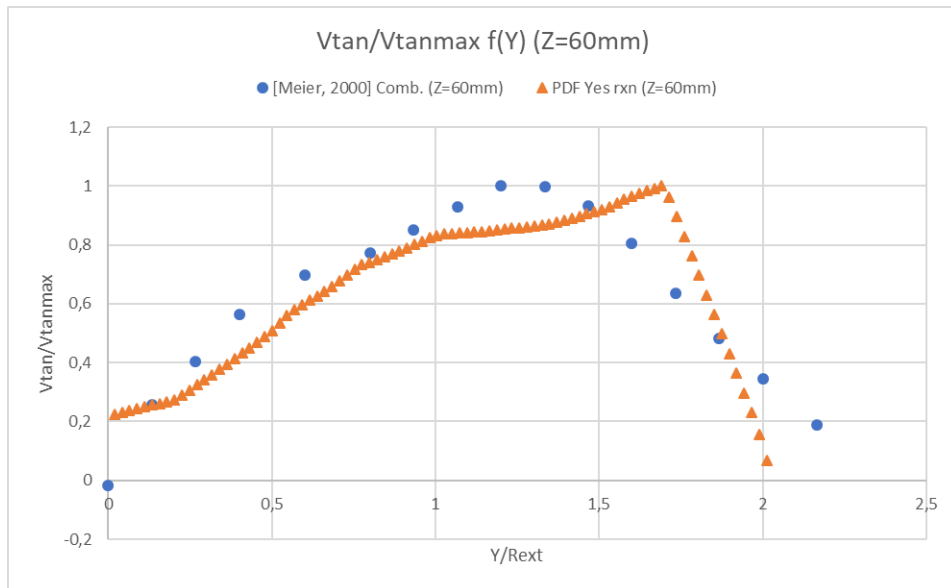


Fig. 6.15. Comparación de velocidades axiales en las cotas  $Z = 1\text{ mm}$ ,  $Z = 10\text{ mm}$ ,  $Z = 20\text{ mm}$ ,  $Z = 30\text{ mm}$ ,  $Z = 60\text{ mm}$ ,  $Z = 90\text{ mm}$ ,  $Z = 120\text{ mm}$ , entre los resultados del modelo de combustión de [Meier, 2000], y el modelo de reacción PDF.





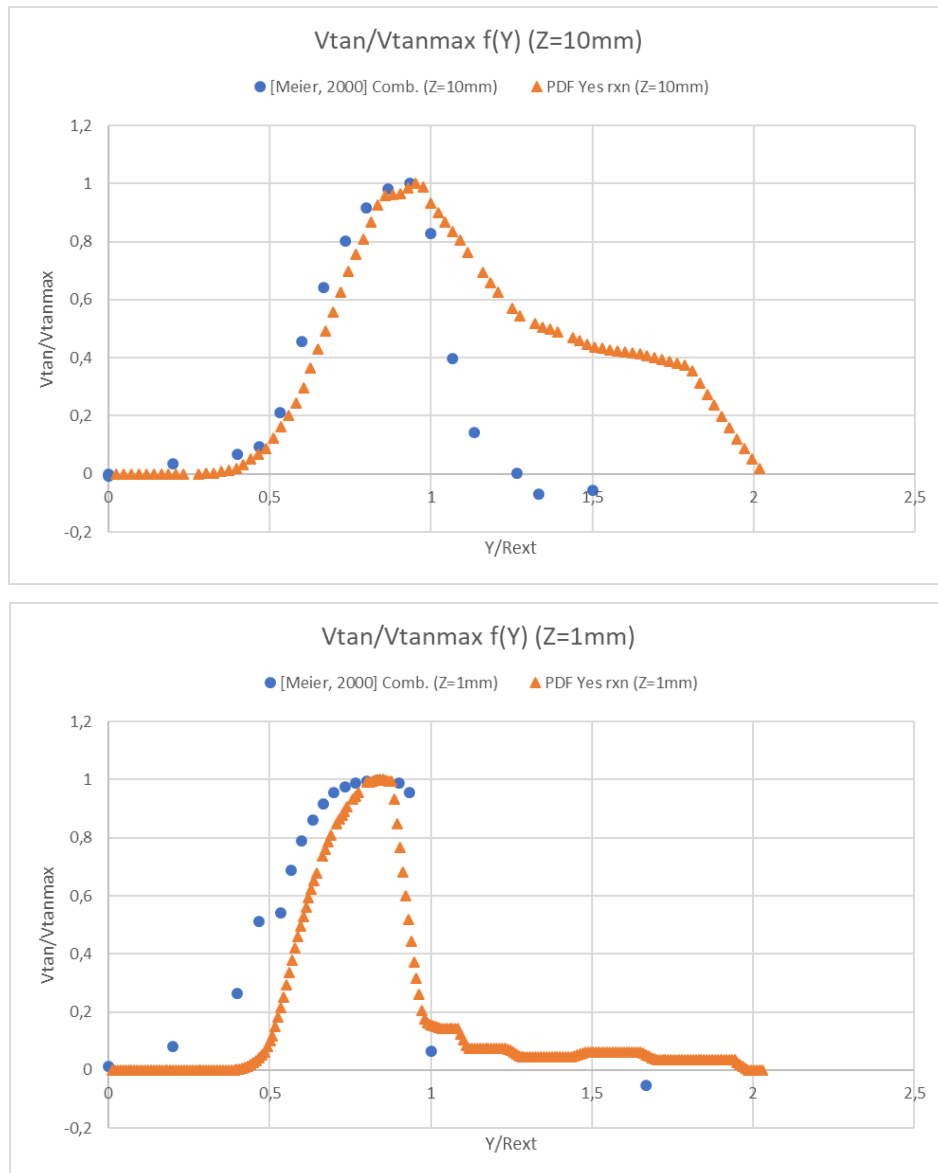


Fig. 6.16. Comparación de velocidades tangenciales en las cotas  $Z = 1 \text{ mm}$ ,  $Z = 10 \text{ mm}$ ,  $Z = 20 \text{ mm}$ ,  $Z = 30 \text{ mm}$ ,  $Z = 60 \text{ mm}$ ,  $Z = 90 \text{ mm}$ ,  $Z = 120 \text{ mm}$ , entre los resultados del modelo de combustión de [Meier, 2000], y el modelo de reacción PDF.

### 6.5.2. Especies químicas

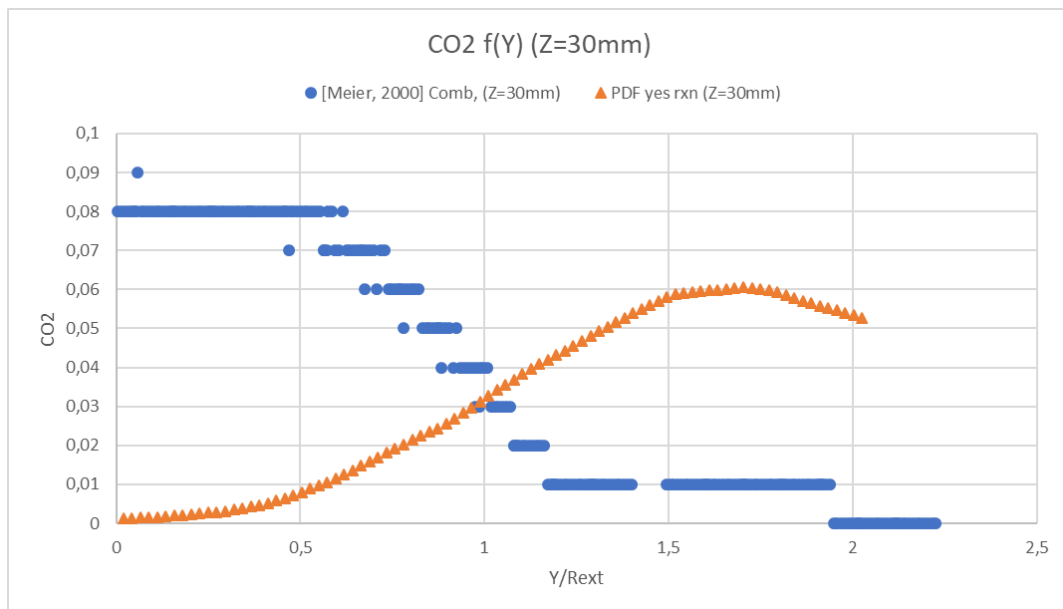
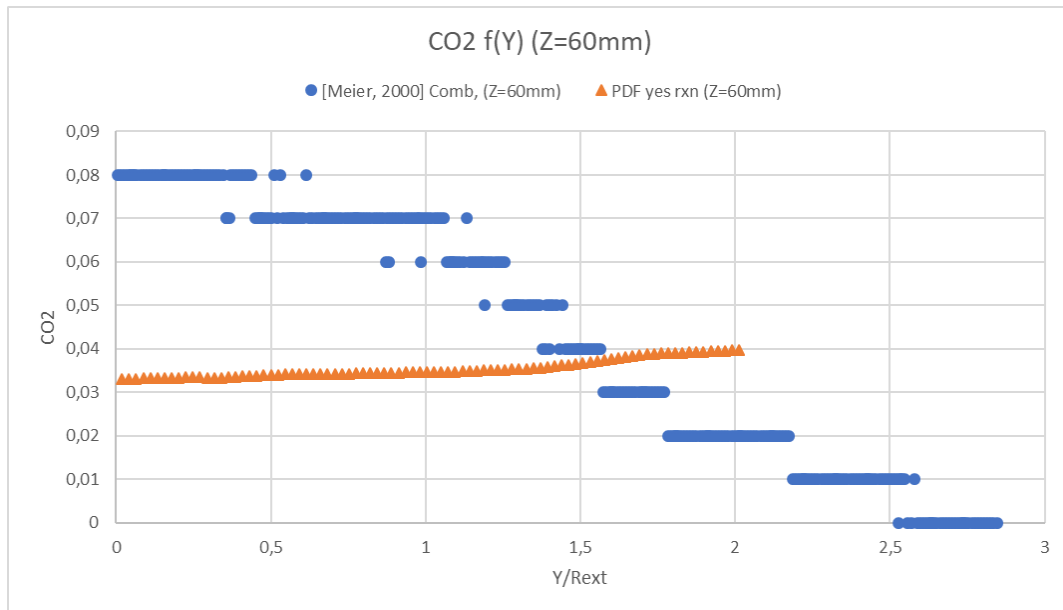
En este apartado se compararán las fracciones másicas de uno de los principales productos de la combustión, el  $\text{CO}_2$ .

La Fig. 6.17 muestra la comparación, para distintas cotas del eje  $Z$ , las fracciones másicas de  $\text{CO}_2$  entre el modelo de combustión de [Meier, 2000] y el modelo PDF. Cabe destacar que la Universidad de Darmstadt ha proporcionado datos de fracciones másicas de  $\text{CO}_2$  con una resolución muy baja (únicamente 2 decimales) para estos perfiles radiales.

A la vista de estas gráficas, se aprecia una clara diferencia entre el modelo PDF (flujo no premezclado) y el de [Meier, 2000] (flujo premezclado), y se trata de que la mayor parte del  $\text{CO}_2$  se acumula en el centro de la tobera, en el caso del modelo de estos autores, mientras que en el modelo PDF dicho  $\text{CO}_2$  se desplaza hacia el exterior. Este fenómeno indica que la reacción se produce en 2 lugares diferentes en función del tipo de flujo que tengamos:

- Flujo premezclado: La reacción tiende a ocurrir hacia el centro de la tobera.
- Flujo no premezclado: La reacción tiende a ocurrir hacia el exterior de la tobera.

Por último, también cabe destacar que en el modelo PDF la reacción finaliza antes, puesto que en  $Z = 60 \text{ mm}$  se puede ver como el perfil radial de  $\text{CO}_2$  ya se ha estabilizado. Esto se debe a que, al tratarse de un flujo no premezclado, las turbulencias que se generan cuando combustible y comburente entran en contacto en la cámara de combustión hacen que se produzca una mejor mezcla y, por tanto, una reacción más rápida.



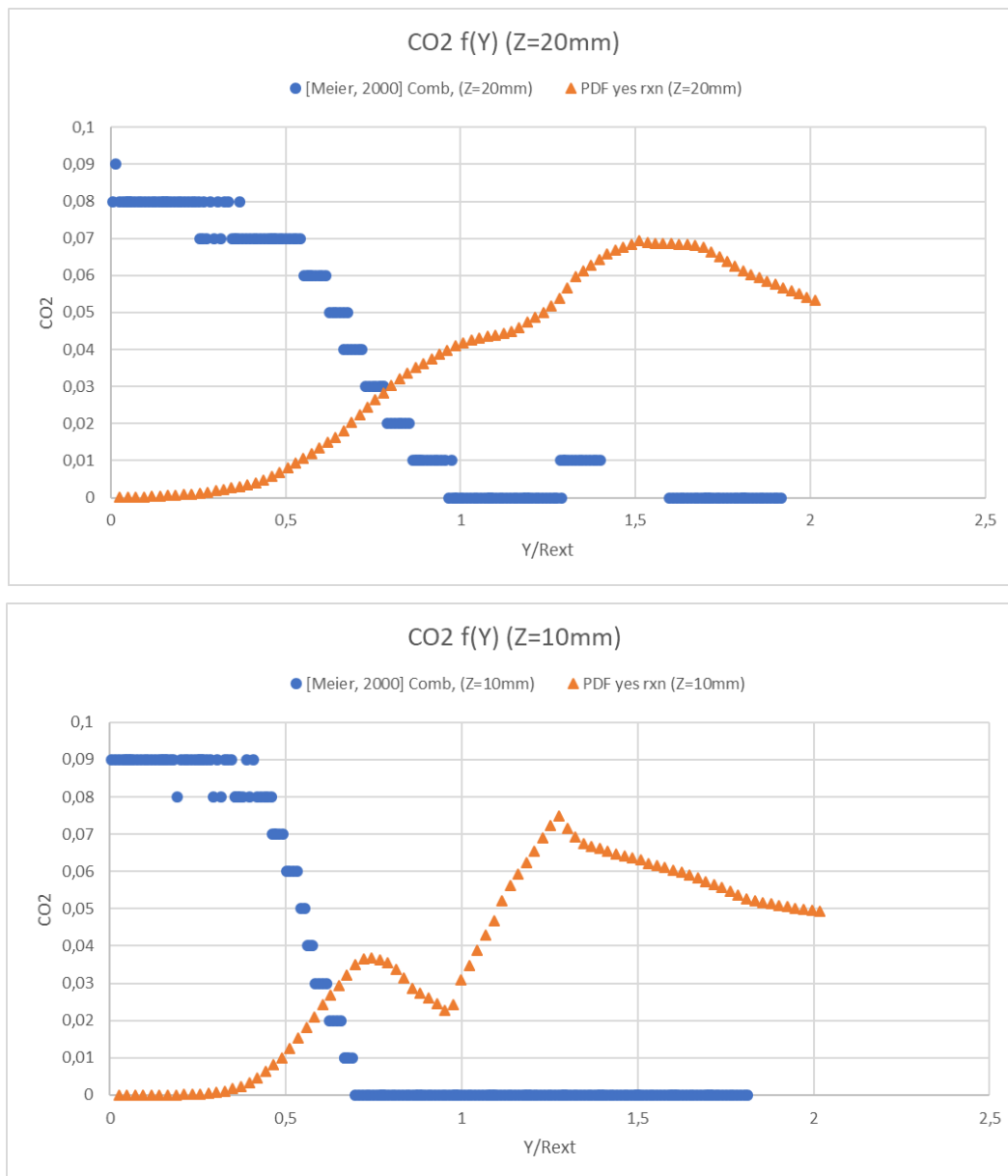


Fig. 6.17. Comparación de la fracción másica de CO<sub>2</sub> en las cotas Z = 10 mm, Z = 20 mm, Z = 30 mm, Z = 60 mm, entre los resultados del modelo de combustión de [Meier, 2000], y el modelo de reacción PDF.

### 6.6. Choi M., Park Y., Li X., Sung Y., Park S., Moon K., Choi G., 2019

Estos autores realizaron una serie de medidas experimentales y modelos numéricos para distintas composiciones de combustibles y diferentes números de swirl, con flujo no premezclado y llama confinada. La particularidad de su estudio es el hecho de incluir 2 generadores swirl en sus experimentos: uno para el combustible y otro para el comburente. Estudiaron cómo afectaba a distintos parámetros el hecho de variar el número de swirl, así como utilizar flujos swirl en el mismo sentido de rotación (*co-swirl*) o en sentidos contrarios (*counter-swirl*). La Fig. 6.18 muestra un esquema (a) y una fotografía (b) del quemador dual swirl estudiado por estos autores.

Debido a las grandes diferencias con el modelo estudiado en este informe, especialmente el utilizar 2 flujos swirl, el estudio de estos autores solamente se empleará para comparar el apartado de las emisiones de NO<sub>x</sub>. Además, puesto que hacen estudios con distintas composiciones de combustible, la comparativa se

realizará con el que tiene más similitudes con el utilizado en este estudio: el que tiene 100% de CH<sub>4</sub> (caso 0 en el estudio de [Choi, 2019]).

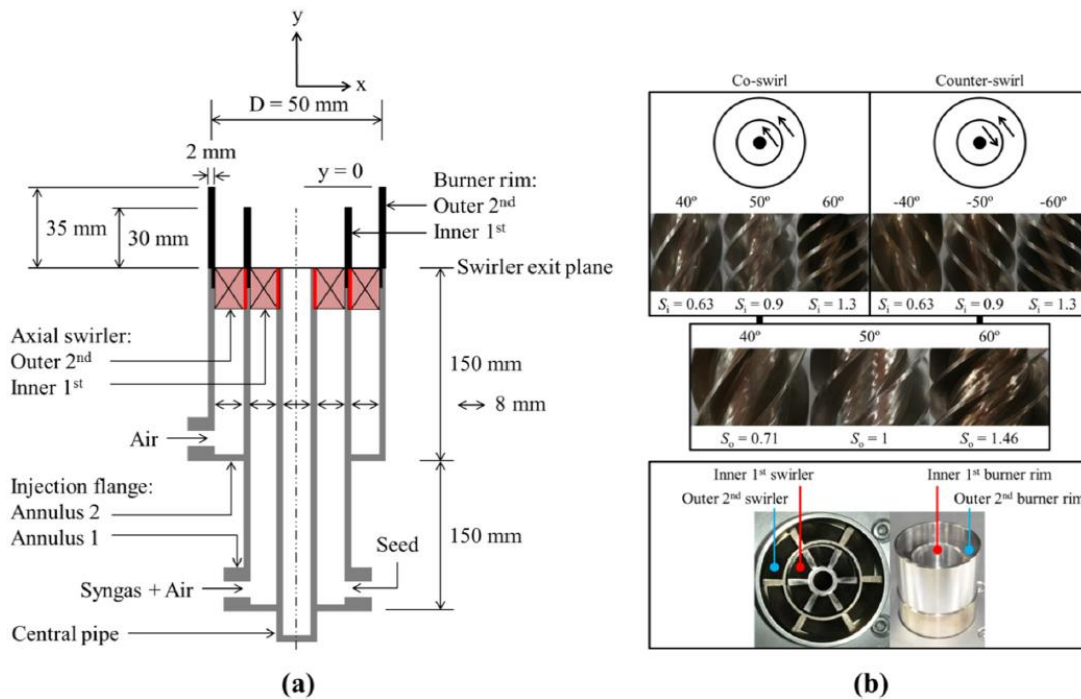


Fig. 6.18. (a) Esquema del sistema de quemador swirl dual (b) fotografías de los generadores swirl interno y externo). Fuente: [Choi, 2019]

### 6.6.1. Emisiones de NO<sub>x</sub>

Puesto que, tal y como se ha comentado en los párrafos anteriores, los modelos y experimentos de [Choi, 2019] y el modelo EDC no son similares en cuanto a la generación del flujo rotante, y en cuanto a la composición de los combustibles, se ha decidido comparar los resultados de los experimentos de estos autores en el caso que utilizaron un combustible 100% CH<sub>4</sub> (Case 0 en su estudio), el más similar al utilizado en el modelo EDC.

Tabla 6.5. Emisiones de NO<sub>x</sub> en los experimentos de [Choi, 2019] y en el modelo EDC NO<sub>x</sub>. Los valores representados entre paréntesis en la columna de [Choi, 2019] corresponden, el primer valor al número de swirl en la tobera del combustible (interior), y el segundo al de la tobera del comburente (exterior)

M. Choi, 2019	EDC NO <sub>x</sub>
43 ppm (Co-swirl 0.63/0.71)	183 ppm (Swirl 1.6 solo en la tobera anular)
23 ppm (Co-swirl 0.9/1)	
20 ppm (Co-swirl 1.3/1.46)	
38 ppm (Counter-swirl 0.63/0.71)	
32 ppm (Counter-swirl 0.9/1)	
27 ppm (Counter-swirl 1.3/1.46)	

Como se puede observar en la tabla 6.2, las emisiones de NO<sub>x</sub> son mucho más bajas en los experimentos de [Choi, 2019] que en el modelo EDC. Esto tiene su razón de ser en el principal causante de la generación de NO<sub>x</sub>, la temperatura. Mientras que en los estudios de estos autores se alcanzaban temperaturas máximas de en torno a 1500 K, en el modelo EDC se superaban los 2000 K en algunas zonas. Por tanto, esto demuestra la importancia de reducir al máximo la temperatura para evitar la formación de NO<sub>x</sub>.

Aunque esta diferencia de emisiones de NO<sub>x</sub> tan significativa se debe principalmente a la temperatura, el hecho de existir un doble flujo swirl (en combustible y comburente), produce que se generen más turbulencias, lo que puede favorecer también la reducción de NO<sub>x</sub>. Sin embargo, a partir de los datos de los que se dispone no se puede extraer ninguna conclusión firme.



# CAPÍTULO 7.

## CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Este capítulo centra su atención en recoger las conclusiones que se han obtenido a lo largo de todo el trabajo expuesto en los anteriores capítulos, así como proponer una serie de líneas para futuras investigaciones, las cuales se han dejado fuera del alcance de este trabajo, debido a falta de tiempo o de recursos.

### 7.1. Modelo de combustión

En cuanto al modelo de combustión, se ha simulado la mezcla estequiométrica ( $\phi=1$ ) con número de swirl igual a 1.6, utilizando 2 modelos de combustión diferentes: PDF con una función  $\beta$  y EDC con un mecanismo de reacción global de 4 reacciones. Se realizó un análisis del campo de temperaturas, patrones de flujo (basado en líneas de corriente proyectadas tangencialmente), velocidades axiales, Reynolds local y especies químicas.

En cuanto a la revisión del estado del arte, he obtenido las siguientes conclusiones:

- a. El modelo PDF es un modelo ampliamente utilizado por numerosos autores, algunos de ellos incluidos en la bibliografía de este trabajo. Por ese motivo, el respaldo de la comunidad científica a este modelo está más que demostrado.
- b. La potencia de cálculo requerida es mucho inferior a la del modelo EDC, lo que proporciona unos tiempos de cálculo muy reducidos y permite ejecutar muchas más simulaciones en menos tiempo.
- c. El modelo EDC ya ha sido analizado más en profundidad por algunos trabajos antecedentes de este, por lo que se eligió el modelo PDF para tratar de abrir una nueva línea de investigación.

Respecto a los resultados obtenidos:

- d. El modelo PDF minorra la temperatura a la salida de la cámara de combustión y la aumenta en la ORZ, lo que genera una zona crítica de cara a la resistencia térmica de los materiales empleados en la construcción de la cámara de combustión.
- e. La ORZ tiene un tamaño inferior en el modelo PDF que en EDC, aunque los perfiles radiales de velocidades axiales son similares.
- f. En el modelo PDF se genera una menor cantidad de CO<sub>2</sub> que en el modelo EDC. Sin embargo, no se consume todo el CH<sub>4</sub>, algo que sí ocurre en el modelo EDC. También se genera más CO en el modelo PDF, algo que no ocurre en el modelo EDC por el mecanismo de 4 reacciones que se ha empleado.

### 7.2. Radiación

Se ha ejecutado el modelo P1 de radiación, partiendo del modelo PDF, para distintas estequiometrías: pobre ( $\phi=0.8$ ), estequiométrica ( $\phi=1$ ) y rica ( $\phi=1.2$ ). Posteriormente, se han comparado los resultados con y sin el modelo de radiación, y se ha observado que sí hay una influencia significativa en los resultados:

- a. La temperatura ha sufrido cambios respecto al modelo sin radiación no solo en la propia cámara de combustión, sino que, además, esto ha afectado a la

temperatura de las dos toberas coaxiales previas a la cámara de combustión, aumentando su temperatura en la tobera interior y reduciéndola en la exterior.

- b. La temperatura en el eje de la cámara de combustión ha disminuido aplicando el modelo de radiación. De hecho, mientras que en los modelos en los que no se aplicó radiación la temperatura en el eje de la cámara de combustión permanecía constante a partir de una cota  $Z = 0.2$  m en el eje, aplicando el modelo de radiación dicha temperatura alcanza un máximo cerca de  $Z = 0.2$  m, para a continuación ir disminuyendo hasta la salida de la cámara de combustión.
- c. El tamaño tanto de la IRZ como de la ORZ es menor en los modelos de radiación, como consecuencia de que, al disminuir la temperatura, lo hace también la velocidad axial.
- d. Aplicando el modelo de radiación se ha visto que la IRZ tiene forma de anillo, mientras que en los modelos sin reacción tiene forma de bulbo. Nuevamente esto vuelve a estar asociado a la disminución de la velocidad axial como consecuencia de la disminución de la temperatura.

### 7.3. Análisis de NOx

Para evaluar las emisiones de NOx del modelo, se ha partido del modelo EDC con mezcla rica ( $\phi=1.2$ ), en el que se ha activado la resolución del modelo de generación de NOx térmico y de reacción. En vista de los resultados obtenidos:

- a. Se ha comprobado que la temperatura alcanzada en el interior de la cámara de combustión permite la formación de óxidos de nitrógeno, llegando a una concentración de entre 178 y 198 ppm.
- b. La mayor parte de las emisiones de NOx se generan en la zona situada entre la IRZ y la ORZ.
- c. Por último, se ha observado que la zona con mayor temperatura en la cámara de combustión coincide con la de máxima concentración de NOx (las paredes de la cámara de combustión en torno a la cota  $Z = 0.1$  m).

### 7.4. Comparación con otras fuentes

Los resultados de los distintos modelos planteados en este trabajo se han comparado con los resultados de otros trabajos de diferentes autores, tanto resultados experimentales [Roback, 1983], [Janus, 2007], [Wegner, 2005], [Choi, 2019], como numéricos [Wegner, 2005], [Meier, 2000], [Choi, 2019], y para distintas variables, como temperatura, velocidad o especies químicas:

- a. En cuanto al informe de [Roback, 1983], en el que se ha basado todo este trabajo, hay que destacar que este autor no realizó experimentos con combustión, sino que únicamente estudió el fenómeno de mezcla. Por ese motivo, únicamente se ha podido validar el modelo de mezcla (sin reacción) con los resultados de los experimentos de este autor. Además, también se ha comprobado que los resultados del modelo PDF (con reacción), evidentemente no coinciden con los del estudio de Roback y Johnson, pero siguen una tendencia similar. Hay que tener en cuenta que el aumento de la temperatura como consecuencia de la combustión puede alterar los patrones de flujo, entre otras cosas.

- b. Respecto al resto de referencias de otros autores con los que se han comparado los modelos estudiados en este trabajo, ninguno de ellos coincidía exactamente con la configuración planteada en los modelos propuestos en este trabajo (flujo no premezclado, llama confinada, forma de generar el flujo rotante, etc.). Partiendo de este hecho, se ha visto que en la mayor parte de ellos los resultados no coinciden, lo que nos lleva a concluir la gran influencia que tiene la forma en que se realiza la descarga de combustible y comburente, el hecho de tener flujo premezclado y no premezclado, o tener una llama confinada o no confinada.

## 7.5. Trabajos futuros

Para próximos estudios que se realicen en el mismo área de investigación de este trabajo, se proponen las siguientes sugerencias:

- A la vista de la gran influencia que tiene la radiación, se debería afrontar el perfeccionamiento del modelo de radiación elegido y/o estudio de otros modelos de radiación a aplicar. Esto sería válido tanto para el modelo PDF como para el EDC
- Profundizar en el estudio de las emisiones de NO<sub>x</sub>:
  - Estudiar las emisiones de NO<sub>x</sub> aplicando el modelo de radiación, puesto que la radiación afecta en gran medida a la temperatura alcanzada en la cámara de combustión y este es uno de los principales causantes de la formación de NO<sub>x</sub>.
  - Observar la influencia del número de swirl en las emisiones de NO<sub>x</sub>.
  - Introducir modificaciones en la geometría de la cámara de combustión para tratar de reducir las emisiones de NO<sub>x</sub> como, por ejemplo, mediante la instalación de un difusor en la descarga.
- Realización de un estudio de este quemador en transitorio, de forma que se pueda observar con mayor claridad la forma en que se desplazan los torbellinos de la IRZ y ORZ, fenómeno conocido como *Vortex Breakdown*: giro de la IRZ en torno a un punto que no pertenece al eje de la cámara de combustión y que a su vez rota, variando su posición en el tiempo [Lucca-Negro, 2001]



# BIBLIOGRAFÍA

---

## Normativas

- **[BOE-A-2007-19744]:**

BOE-A-2007-19744, Jefatura del Estado, Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera. Última modificación: 23 de diciembre del 2017.

## Referencias

- **[Boushaki, 2017]:**

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

- **[Centeno, 2016]**

Centeno F. R., Brittes R., França F., da Silva C. R., "Application of the WSGG model for the calculation of gas-soot radiation in a turbulent non-premixed methane-air flame inside a cylindrical combustion chamber", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 93, (2016), 742-753

- **[Choi, 2019]**

Choi M., Park Y., Li X., Sung Y., Park S., Moon K., Choi G., "Study on flame structures and emission characteristics according to various swirl combinations and fuel compositions in a CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/CO syngas swirl-stabilized combustor", *Fuel*, 253 (2019) 887–903

- **[Crespo, 2006]**

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

- **[Crnjac, 2017]**

Crnjac P., Škerget L., Ravnik J., Hriberšek M., "Implementation of the Rosseland and the P1 radiation models in the system of Navier-Stokes equations with the boundary element method", *Int. J. Comp. Meth. and Exp. Meas.*, 5/3 (2017) 348–358

- **[IEA, 2018]**

IEA, "World Energy Outlook 2018", IEA, (2018)

- **[Janus, 2007]**

Janus B., Dreizler A., Janicka J., "Experiments on swirl stabilized non-premixed natural gas flames in a model gasturbine combustor", *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 (2007) 3091–3098

- **[Jones, 1982]**

Jones W.P., Whitelaw J.H., "Calculation methods for reacting turbulent flows: A review", *Combustion and Flame*, 48 (1982), 1-26

- **[Kim, 2016]**

Kim T. H., Park J. W., Park H. Y., Park J., Park J. H., Lim I. G., "Chemical and radiation effects on flame extinction and NO<sub>x</sub> formation in oxy-methane combustion diluted with CO<sub>2</sub>", *Fuel*, 177, (2016), 235-243

- **[Lucca-Negro, 2001]**

Lucca-Negro O., O'Doherty, T., "Vortex breakdown: a review", Cardiff School of Engineering, Cardiff University, Progress in Energy and Combustion Science, 27/4 (2001), 431–481.

- **[Meier, 2000]**

Meier W., Keck O., Noll B., Kunz O., Stricker W., "Investigations in the TECFLAM swirling diffusion flame: Laser Raman measurements and CFD calculations", Appl. Phys. B, 71 (2000), 725-731

- **[Oh, 2013]**

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

- **[Parra-Santos, 2015]**

Parra-Santos M. T., Mendoza-García V., Szasz R., Gutkowski A. N., Castro-Ruiz F., "Influence of Flow Swirling on the Aerothermodynamic Behaviour of Flames", Combustion Explosion and Shock Waves, 51 (2015), 424-430.

- **[Pastor, 2017]**

Pastor D. "Estudio de la combustión en un quemador de flujo rotante variando la estequiometría, dosado y modelo de combustión", TFG, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (España), (2017)

- **[Pérez, 2016]**

Pérez, J.R., "Aerodinámica, turbulencia y combustión no premezclada en quemadores de flujo rotante", Tesis doctoral, Universidad de Valladolid, Escuela de Ingenierías Industriales, Valladolid (España), (2016)

- **[Poinsot, 2017]**

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

- **[Roback, 1983]**

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

- **[Samiran, 2019]**

Samiran N.A., Chong C.T., Ng J.H., Tran M.V., Ong H.C., Valera-Medina A., Chong W.W.F., Jaafar M.N.M., "Experimental and numerical studies on the premixed syngas swirl flames in a model combustor", International journal of hydrogen energy, 44 (2019), 24126-24139

- **[Shaddix, 2017]**

Shaddix C.R., Williams T. C., "The effect of oxygen enrichment on soot formation and thermal radiation in turbulent, non-premixed methane flames", Proceedings of the Combustion Institute, 36, (2017), 4051-4059

- **[Stokes, 2014]**

Stokes C., "Numerical modelling of non-premixed combustion for piloted jets", Tesis doctoral, Cranfield University, School of Engineering, Cranfield (Reino Unido), (2014)

- **[Subramanian, 2010]**

Subramanian V., Domingo P., Vervisch L. "Large Eddy Simulation of Forced Ignition of an Annular Bluff-Body Burner", Combustion and Flame, 157/3 (2010), 579-601

- **[Wegner, 2005]**

Wegner B., Janus B., Sadiki A., Dreizler A., Janicka J., "Study of flow and mixing in a generic gt combustor using LES", Engineering Turbulence Modelling and Experiments, 6 (2005), 731-740

- **[Wendt, 2009]**

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

## **Páginas web**

- **[Mit]**

<http://web.mit.edu/beh.430/www/BEH430/Extras/Week2/A%20word%20about%20Damkohler%20numbers3.htm>

(Última visita: 02/02/2020)

- **[Ocw]**

[http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/1015/mod\\_resource/content/1/1C\\_C12757\\_0910/04\\_GT17\\_Reduccion\\_de\\_NOX\\_en\\_humos.pdf](http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/1015/mod_resource/content/1/1C_C12757_0910/04_GT17_Reduccion_de_NOX_en_humos.pdf)

(Última visita: 02/02/2020)

- **[BP]**

[https://www.bp.com/es\\_mx/mexico/home/press-releases/informe-estadistico-mundial-de-energia-de-bp-2018.html](https://www.bp.com/es_mx/mexico/home/press-releases/informe-estadistico-mundial-de-energia-de-bp-2018.html)

(Última visita: 02/02/2020)

- **[Periódico de la Energía]**

<https://elperiodicodelaenergia.com/informe-weo-2018-de-la-aie-dos-tercios-de-la-generacion-electrica-mundial-provendra-de-fuentes-renovables-en-2040/>

(Última visita: 02/02/2020)

- **[Rose-Hulman]**

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

(Última visita: 02/02/2020)

- **[Wikipedia]**

[https://en.wikipedia.org/wiki/Reynolds-averaged\\_Navier%E2%80%93Stokes\\_equations](https://en.wikipedia.org/wiki/Reynolds-averaged_Navier%E2%80%93Stokes_equations)

(Última visita: 02/02/2020)





# ANEXOS

---

Aquí se presentan los informes de configuración de Ansys Fluent® 14.5 para los diferentes modelos empleados en el trabajo, con el objetivo de poder reproducir estas condiciones en el futuro.

## Modelo EDC

Fluent

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

Release: 14.5.7

Title:

Models

-----

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	RNG k-epsilon turbulence model
Wall Treatment	Standard Wall Functions
RNG Differential Viscosity Model	Disabled
RNG Swirl Dominated Flow Option	Enabled
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	None
Species	Reacting (8 species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Disabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

Material Properties

-----

Material: methane-air (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species		names	((CH4 o2 CO2 h2o n2 CH4-inerte h2 co) () ())
Reaction		finite-rate	((reaction-1 ((CH4 1 0.5 1) (o2 0.5 1.25 1)) ((co 1 0 1) (h2 2 0 1)) ((CO2 0 1) (h2o 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1)) (stoichiometry 1CH4 + 0.5o2 --> 1co + 2h2) (arrhenius 7.82e+13 1.254e+08 0) (mixing-rate 0 0) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-2 ((CH4 1 1 1) (h2o 1 1 1)) ((co 1 0 1) (h2 3 0 1)) ((o2 0 1) (CO2 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1)) (stoichiometry 1CH4 + 1h2o --> 1co + 3h2) (arrhenius 3e+11 1.254e+08 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-3 ((h2 1 0.25 1) (o2 0.5 1.5 1)) ((h2o 1 0 1)) ((CH4 0 1) (CO2 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1) (co 0 1)) (stoichiometry 1h2 + 0.5o2 --> 1h2o) (arrhenius 1.209e+18 1.672e+08 -1) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-4 ((co 1 1 1) (h2o 1 1 1)) ((CO2 1 0 1) (h2 1 0 1)) ((CH4 0 1) (o2 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1)) (stoichiometry 1co + 1h2o --> 1CO2 + 1h2) (arrhenius 2.75e+12 83600000 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)))
Mechanism		reaction-mechs	((mechanism-1 (reaction-type . volumetric) (reaction-list reaction-1 reaction-2 reaction-3 reaction-4) (site-info)))
Density	kg/m3	incompressible-ideal-gas	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.045400001
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05

Mass Diffusivity m2/s constant-dilute-appx (2.8799999e-05)  
 Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 -0.0020082949 3.5166462e-07 - 2.3339101e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: methane-inerte (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.66790003
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 -0.0020082949 3.5166462e-07 - 2.3339101e-11)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.033199999
Viscosity	kg/m-s	constant	1.087e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04297 0.41796389 -0.0011762792 1.6743943e-06 -7.2562972e-10) (1000-5000: 868.62292 0.44162953 -0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.013399
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.8
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.0767 1.6037546 -0.0029327841 3.2161008e-06 -1.1568267e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 -0.0004029141 5.5427719e-08 - 2.949824e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.015341
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.418379e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188696.44
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

```

-----
Cp (Specific Heat)      j/kg-k    polynomial (300-1000: 429.92889 1.8744735 -0.0019664851
1.2972514e-06 -3.9999562e-10) (1000-5000: 841.37646 0.59323931 -0.00024151675 4.5227278e-08
-3.1531301e-12)
Molecular Weight      kg/kgmol  constant   44.009949
Standard State Enthalpy j/kgmol   constant  -3.9353235e+08
Standard State Entropy j/kgmol-k  constant   213720.2
Reference Temperature  k         constant   298.14999
Speed of Sound        m/s      none      #f

```

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

```

Property      Units      Method      Value(s)
-----
Cp (Specific Heat)      j/kg-k    polynomial (300-1000: 834.82647 0.29295801 -0.00014956371
3.4138849e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.75234 0.15941258 -3.2708852e-05 4.6127648e-09
-2.9528324e-13)
Molecular Weight      kg/kgmol  constant   31.9988
Standard State Enthalpy j/kgmol   constant    0
Standard State Entropy j/kgmol-k  constant  205026.86
Reference Temperature  k         constant   298.15
Speed of Sound        m/s      none      #f

```

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

```

Property      Units      Method      Value(s)
-----
Cp (Specific Heat)      j/kg-k    polynomial (300-1000: 403.5847 9.0573346 -0.014425086
1.5805188e-05 -6.3430511e-09) (1000-5000: 872.46708 5.3054727 -0.002008295 3.5166462e-07 -
2.3339102e-11)
Molecular Weight      kg/kgmol  constant   16.04303
Standard State Enthalpy j/kgmol   constant  -74895176
Standard State Entropy j/kgmol-k  constant  186040.09
Reference Temperature  k         constant   298.15
Speed of Sound        m/s      none      #f

```

Material: air (fluid)

```

Property      Units      Method      Value(s)
-----
Density      kg/m3     constant    1.225
Cp (Specific Heat)      j/kg-k    polynomial (100-1000: 1161.4821 -2.368819 0.014855111 -
5.0349092e-05 9.9285693e-08 -1.1110966e-10 6.5401962e-14 -1.5735877e-17) (1000-3000: -
7069.814 33.706051 -0.058127593 5.4216154e-05 -2.9366788e-08 9.2375335e-12 -1.5655534e-15
1.1123348e-19)
Thermal Conductivity    w/m-k     constant    0.0242
Viscosity              kg/m-s    constant  1.7894001e-05
Molecular Weight      kg/kgmol  constant   28.966
Standard State Enthalpy j/kgmol   constant    0
Standard State Entropy j/kgmol-k  constant  194336
Reference Temperature  k         constant   298.14999
Thermal Expansion Coefficient 1/k     constant    0
Speed of Sound        m/s      none      #f

```

Material: aluminum (solid)

```

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

```

Material: carbon-monoxide (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.1233
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.38986 0.44878771 -0.0011522171 1.6568822e-06 -7.34637e-10) (1000-5000: 897.93053 0.42823161 -0.00016713923 3.0234435e-08 -2.05137e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.025
Viscosity	kg/m-s	constant	1.75e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.01055
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053956e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197531.64
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: hydrogen (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.08189
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.452 3.4023168 -0.0033584233 -3.9079528e-07 1.7053451e-09) (1000-5000: 12337.526 2.8872753 -0.00023235597 -3.8073793e-08 6.5277423e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.1672
Viscosity	kg/m-s	constant	8.411e-06
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130579.06
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.452 3.4023168 -0.0033584233 -3.9079528e-07 1.7053451e-09) (1000-5000: 12337.526 2.8872753 -0.00023235597 -3.8073793e-08 6.5277423e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130579.06
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

Cell Zone Conditions

Zones

```

name id type
-----
zone1 44 fluid

```

Setup Conditions

zone1

Condition	Value
Material Name	methane-air
Specify source terms?	no
Source Terms	((mass) (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum) (k) (epsilon) (species-0) (species-1) (species-2) (species-3) (species-4) (species-5) (species-6) (energy))
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Fixed Values	((x-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (y-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (z-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (k (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (epsilon (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-0 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-1 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-2 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-3 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-4 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-5 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-6 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (temperature (inactive . #f) (constant . 0) (profile )))
Frame Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)	0
Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame X-Component of Rotation-Axis	0
Reference Frame Y-Component of Rotation-Axis	0
Reference Frame Z-Component of Rotation-Axis	1
Reference Frame User Defined Zone Motion Function	none
Mesh Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Moving Mesh Rotation Speed (rad/s)	0
Moving Mesh X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis	0
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis	0
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis	1
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function	none
Deactivated Thread	no
Laminar zone?	no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	yes
Embedded Subgrid-Scale Model	0
Momentum Spatial Discretization	0
Cwale	0.325
Cs	0.1
Porous zone?	no
Conical porous zone?	no

X-Component of Direction-1 Vector	1
Y-Component of Direction-1 Vector	0
Z-Component of Direction-1 Vector	0
X-Component of Direction-2 Vector	0
Y-Component of Direction-2 Vector	1
Z-Component of Direction-2 Vector	0
X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	yes
Direction-1 Viscous Resistance (1/m2)	0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m2)	0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m2)	0
Choose alternative formulation for inertial resistance?	no
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
C0 Coefficient for Power-Law	0
C1 Coefficient for Power-Law	0
Porosity	1
Equilibrium Thermal Model (if no, Non-Equilibrium)?	yes
Non-Equilibrium Thermal Model?	no
Solid Material Name	aluminum
Interfacial Area Density (1/m)	1
Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	1
Reaction Mechanism	0
Activate reaction mechanisms?	yes
Surface-Volume-Ratio (1/m)	0

#### Boundary Conditions

-----

#### Zones

name	id	type
-----		
wall-1	45	wall
inner_inlet	47	velocity-inlet
outer_inlet	48	velocity-inlet
outlet	49	pressure-outlet

#### Setup Conditions

wall-1

Condition	Value
-----	
Wall Thickness (m)	0
Heat Generation Rate (w/m3)	0
Material Name	aluminum
Thermal BC Type	1
Temperature (k)	300
Heat Flux (w/m2)	0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0
Free Stream Temperature (k)	300
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	0
Shear Boundary Condition	0

```

Define wall motion relative to adjacent cell zone? yes
Apply a rotational velocity to this wall? no
Velocity Magnitude (m/s) 0
X-Component of Wall Translation 1
Y-Component of Wall Translation 0
Z-Component of Wall Translation 0
Define wall velocity components? no
X-Component of Wall Translation (m/s) 0
Y-Component of Wall Translation (m/s) 0
Z-Component of Wall Translation (m/s) 0
External Emissivity 1
External Radiation Temperature (k) 300
Wall Roughness Height (m) 0
Wall Roughness Constant 0.5
(0)
((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0)
(profile ))
Rotation Speed (rad/s) 0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m) 0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m) 0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m) 0
X-Component of Rotation-Axis Direction 0
Y-Component of Rotation-Axis Direction 0
Z-Component of Rotation-Axis Direction 1
X-component of shear stress (pascal) 0
Y-component of shear stress (pascal) 0
Z-component of shear stress (pascal) 0
Fslip constant 0
Eslip constant 0
Surface tension gradient (n/m-k) 0
Specularity Coefficient 0
Convective Augmentation Factor 1

```

inner\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	0.66
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	300
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	12
Turbulent Length Scale (m)	1

Hydraulic Diameter (m) 0.03  
 Turbulent Viscosity Ratio 10  
 Specify Species in Mole Fractions? no  
 (((constant . 0.234) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.766) (profile )) ((constant . 0) (profile )))  
 is zone used in mixing-plane model? no

outer\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	1200
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	7.4999998
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.032
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no
	(((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.22) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.78) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
is zone used in mixing-plane model?	no

outlet

Condition	Value
Gauge Pressure (pascal)	0
Backflow Total Temperature (k)	300
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	2



Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	5
Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no
Backflow	((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile ))
is zone used in mixing-plane model?	no
Radial Equilibrium Pressure Distribution	no
Specify Average Pressure Specification	no
Specify targeted mass flow rate	no
Targeted mass flow (kg/s)	1
Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	5000000
Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	1

### Solver Settings

-----

#### Equations

Equation	Solved
Flow	yes
Turbulence	yes
CH4	yes
o2	yes
CO2	yes
h2o	yes
n2	yes
CH4-inerte	yes
h2	yes
Energy	yes

#### Numerics

Numeric	Enabled
Absolute Velocity Formulation	yes

#### Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Pressure	0.3
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.60000002
Turbulent Kinetic Energy	0.69999999
Turbulent Dissipation Rate	0.69999999
Turbulent Viscosity	0.89999998
CH4	0.89999998
o2	0.89999998
CO2	0.89999998
h2o	0.89999998
n2	0.89999998
CH4-inerte	1
h2	1
Energy	0.95999998

Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Reduction Tolerance
Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
CH4	Flexible	0.1	0.7
o2	Flexible	0.1	0.7
CO2	Flexible	0.1	0.7
h2o	Flexible	0.1	0.7
n2	Flexible	0.1	0.7
CH4-inerte	Flexible	0.1	0.7
h2	Flexible	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	0.7

Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value
Type	SIMPLE

Discretization Scheme

Variable	Scheme
Pressure	Second Order
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
CH4	Second Order Upwind
o2	Second Order Upwind
CO2	Second Order Upwind
h2o	Second Order Upwind
n2	Second Order Upwind
CH4-inerte	Second Order Upwind
h2	Second Order Upwind
Energy	Second Order Upwind

Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	290
Maximum Temperature	5000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000

## Modelo PDF

Fluent

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

Release: 14.5.7

Title:

Models

-----

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	RNG k-epsilon turbulence model
Wall Treatment	Standard Wall Functions
RNG Differential Viscosity Model	Disabled
RNG Swirl Dominated Flow Option	Enabled
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	None
Species	Reacting (#f species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Disabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

Material Properties

-----

Material: pdf-mixture (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species	names		(CH4 n2 o2 CH4-inerte h2o h2 co CO2 h oh o ho2 h2o2 hco cho hono c2h6 hoco o3 hcooh)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: 168.47072 3.4160115 -0.0028089748 1.3169124e-06 -2.6802301e-10) (1500-4000: 1437.8848 0.54636862 -6.2038096e-05 -2.3967481e-08 4.5527045e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	46.02568
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.8749678e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	248004.19
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (o3 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 426.57767 1.6599477 -0.0012276859 2.3616526e-07 5.1440793e-11) (1000-5000: 940.48603 0.31532971 -0.000133478 2.5971038e-08 -1.8631106e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.9982
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1.426898e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	238850.58
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: 422.03987 2.4959696 -0.0021431596 9.3213399e-07 -1.6681655e-10) (1500-4000: 1388.4341 0.23253041 -3.529247e-05 -5.79261e-09 1.393982e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	45.01774
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.9368383e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	251548.57
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (c2h6 . pdf-mixture) (fluid)

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 405.06018 2.4934515 -0.0024190849 1.3261613e-06 -3.3193117e-10) (1000-5000: 970.35838 0.7459658 -0.00029165133 5.255771e-08 -3.5744059e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.01344
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-76735619
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	249337.65
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 830.42975 1.7761804 -0.0027572078 3.1225683e-06 -1.3107969e-09) (1000-5000: 1019.2299 0.95857389 -0.00038250616 7.0786873e-08 -4.9105261e-12)

Molecular Weight	kg/kgmol	constant	29.01834
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	43516831
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	224528.15
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 830.42975 1.7761804 -0.0027572078 3.1225683e-06 -1.3107969e-09) (1000-5000: 1019.2299 0.95857389 -0.00038250616 7.0786873e-08 -4.9105261e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	29.01834
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	43516831
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	224528.15
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 750.64746 1.2586592 -0.0009549455 5.9301684e-07 -2.037611e-10) (1000-5000: 1025.7778 0.53686973 -0.00013371124 1.5396699e-08 -7.1568424e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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

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

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

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

Material: (CO2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.93022 1.8744798 -0.0019664917 1.2972557e-06 -3.9999695e-10) (1000-5000: 841.37933 0.59324115 -0.00024151756 4.5227419e-08 -3.153141e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.0098
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9354283e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213734.59
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.39484 0.44879012 -0.0011522231 1.656891e-06 -7.3464085e-10) (1000-5000: 897.9353 0.4282339 -0.0001671401 3.0234596e-08 -2.0513808e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0104
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053974e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197546.27
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 13602.855 3.4024177 -0.0033585231 - 3.9080689e-07 1.7053957e-09) (1000-5000: 12337.891 2.8873611 -0.00023236285 -3.8074924e-08 6.5279369e-12)

Molecular Weight kg/kgmol constant 2.01588  
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant 2448.5948  
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 130593.59  
 Reference Temperature k constant 298.15  
 Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.0818 1.6037598 -0.0029327939 3.2161116e-06 -1.1568305e-09) (1000-5000: 1233.2377 1.4105281 -0.00040291547 5.5427906e-08 - 2.949834e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01528
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.4184276e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188713.27
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (CH4-inerte . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5915 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000: 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 - 2.3339494e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04276
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74892973
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186057.77
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82638 0.29295803 -0.0001495637 3.4138851e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.7523 0.15941258 -3.2708853e-05 4.6127636e-09 - 2.9528327e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-847.64045
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205041.62
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04296 0.41796388 -0.001176279 1.6743942e-06 -7.2562943e-10) (1000-5000: 868.62287 0.44162954 -0.00016872292 2.9967875e-08 -2.0043856e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1429.881
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191509.42

Reference Temperature k constant 298.15  
 Speed of Sound m/s none #f

Material: (CH4 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5915 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000: 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04276
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74892973
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186057.77
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: methane-air (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species		names	((CH4 o2 CO2 h2o n2 CH4-inerte h2 co) () ())
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.045400001
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.66790003
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 -0.0020082949 3.5166462e-07 -2.3339101e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.138
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04297 0.41796389 -0.0011762792 1.6743943e-06 -7.2562972e-10) (1000-5000: 868.62292 0.44162953 -0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.013399
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.8
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.5542



Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 1563.0767 1.6037546 -0.0029327841 3.2161008e-06 -1.1568267e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 -0.0004029141 5.5427719e-08 -2.949824e-12)

Molecular Weight kg/kgmol constant 18.015341  
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -2.418379e+08  
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 188696.44  
 Reference Temperature k constant 298.14999  
 Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)
-----			
Density	kg/m3	constant	1.7878
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.92889 1.8744735 -0.0019664851 1.2972514e-06 -3.9999562e-10) (1000-5000: 841.37646 0.59323931 -0.00024151675 4.5227278e-08 -3.1531301e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.009949
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9353235e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
-----			
Density	kg/m3	constant	1.2999
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82647 0.29295801 -0.00014956371 3.4138849e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.75234 0.15941258 -3.2708852e-05 4.6127648e-09 -2.9528324e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205026.86
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
-----			
Density	kg/m3	constant	0.6679
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5847 9.0573346 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.3430511e-09) (1000-5000: 872.46708 5.3054727 -0.002008295 3.5166462e-07 -2.3339102e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: aluminum (solid)

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.08189
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.452 3.4023168 -0.0033584233 -3.9079528e-07 1.7053451e-09) (1000-5000: 12337.526 2.8872753 -0.00023235597 -3.8073793e-08 6.5277423e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130579.06
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.1233
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.38986 0.44878771 -0.0011522171 1.6568822e-06 -7.34637e-10) (1000-5000: 897.93053 0.42823161 -0.00016713923 3.0234435e-08 -2.05137e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.01055
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053956e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197531.64
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

#### Cell Zone Conditions

##### Zones

name	id	type
zone1	44	fluid

##### Setup Conditions

zone1

Condition	Value
Material Name	pdf-mixture
Specify source terms?	no
Source Terms	((mass) (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum) (k) (epsilon) (species-0) (species-1) (species-2) (species-3) (species-4) (species-5) (species-6) (energy))
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Fixed Values	((x-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (y-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (z-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (k (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (epsilon (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-0 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-1 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-2 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-3 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-4 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-5 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-6 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (temperature (inactive . #f) (constant . 0) (profile )))
Frame Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)	0
Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (m)	0

Reference Frame Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame X-Component of Rotation-Axis	0
Reference Frame Y-Component of Rotation-Axis	0
Reference Frame Z-Component of Rotation-Axis	1
Reference Frame User Defined Zone Motion Function	none
Mesh Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Moving Mesh Rotation Speed (rad/s)	0
Moving Mesh X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis	0
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis	0
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis	1
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function	none
Deactivated Thread	no
Laminar zone?	no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	yes
Embedded Subgrid-Scale Model	0
Momentum Spatial Discretization	0
Cwale	0.325
Cs	0.1
Porous zone?	no
Conical porous zone?	no
X-Component of Direction-1 Vector	1
Y-Component of Direction-1 Vector	0
Z-Component of Direction-1 Vector	0
X-Component of Direction-2 Vector	0
Y-Component of Direction-2 Vector	1
Z-Component of Direction-2 Vector	0
X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	yes
Direction-1 Viscous Resistance (1/m <sup>2</sup> )	0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m <sup>2</sup> )	0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m <sup>2</sup> )	0
Choose alternative formulation for inertial resistance?	no
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
C0 Coefficient for Power-Law	0
C1 Coefficient for Power-Law	0
Porosity	1
Equilibrium Thermal Model (if no, Non-Equilibrium)?	yes
Non-Equilibrium Thermal Model?	no
Solid Material Name	aluminum
Interfacial Area Density (1/m)	1
Heat Transfer Coefficient (w/m <sup>2</sup> -k)	1

#### Boundary Conditions

-----

#### Zones

name	id	type
-----		
wall-1	45	wall
inner_inlet	47	velocity-inlet
outer_inlet	48	velocity-inlet
outlet	49	pressure-outlet

### Setup Conditions

wall-1

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

inner\_inlet

Condition	Value
-----	
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	0.66

Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	300
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	12
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.03
Turbulent Viscosity Ratio	10
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

outer\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	1200
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	7.4999998
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.032
Turbulent Viscosity Ratio	10
Mean Mixture Fraction	0
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

outlet

Condition	Value
-----	-----
Gauge Pressure (pascal)	0
Backflow Total Temperature (k)	300
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	2
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	5
Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
Mean Mixture Fraction	0
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no
Radial Equilibrium Pressure Distribution	no
Specify Average Pressure Specification	no
Specify targeted mass flow rate	no
Targeted mass flow (kg/s)	1
Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	5000000
Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	1

#### Solver Settings

-----

#### Equations

Equation	Solved
-----	-----
Flow	yes
Turbulence	yes
Energy	yes
Pdf	yes

#### Numerics

Numeric	Enabled
-----	-----
Absolute Velocity Formulation	yes

#### Relaxation

Variable	Relaxation Factor
-----	-----
Pressure	0.3
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.60000002
Turbulent Kinetic Energy	0.69999999
Turbulent Dissipation Rate	0.69999999
Turbulent Viscosity	0.89999998

Energy	1
Temperature	0.95999998
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0.9

#### Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Reduction Tolerance
Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	0.7
Mean Mixture Fraction	Flexible	0.1	0.7
Mixture Fraction Variance	Flexible	0.1	0.7

#### Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value
Type	SIMPLE

#### Discretization Scheme

Variable	Scheme
Pressure	Second Order
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
Energy	First Order Upwind
Mean Mixture Fraction	First Order Upwind
Mixture Fraction Variance	First Order Upwind

#### Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	290
Maximum Temperature	5000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000

# Modelo PDF con radiación

Fluent

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

Release: 14.5.7

Title:

Models

-----

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	RNG k-epsilon turbulence model
Wall Treatment	Standard Wall Functions
RNG Differential Viscosity Model	Disabled
RNG Swirl Dominated Flow Option	Enabled
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	P1 Model
Species	Non-Premixed Combustion ((CH4 n2 o2 CH4-inerte h2o h2 co CO2 h oh o ho2 h2o2 hco cho hono c2h6 hoco o3 hcooh) species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Disabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

Material Properties

-----

Material: pdf-mixture (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species	names		(CH4 n2 o2 CH4-inerte h2o h2 co CO2 h oh o ho2 h2o2 hco cho hono c2h6 hoco o3 hcooh)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Absorption Coefficient	1/m	constant	0
Scattering Coefficient	1/m	constant	0
Scattering Phase Function		isotropic	#f
Refractive Index		constant	1
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: 168.47072 3.4160115 -0.0028089748 1.3169124e-06 -2.6802301e-10) (1500-4000: 1437.8848 0.54636862 -6.2038096e-05 -2.3967481e-08 4.5527045e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	46.02568
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.8749678e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	248004.19
Reference Temperature	k	constant	298.15



Speed of Sound      m/s      none      #f

Material: (o3 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 426.57767 1.6599477 -0.0012276859 2.3616526e-07 5.1440793e-11) (1000-5000: 940.48603 0.31532971 -0.000133478 2.5971038e-08 -1.8631106e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.9982
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1.426898e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	238850.58
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1500: 422.03987 2.4959696 -0.0021431596 9.3213399e-07 -1.6681655e-10) (1500-4000: 1388.4341 0.23253041 -3.529247e-05 -5.79261e-09 1.393982e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	45.01774
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.9368383e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	251548.57
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (c2h6 . pdf-mixture) (fluid)

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 405.06018 2.4934515 -0.0024190849 1.3261613e-06 -3.3193117e-10) (1000-5000: 970.35838 0.7459658 -0.00029165133 5.255771e-08 -3.5744059e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	47.01344
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-76735619
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	249337.65
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 830.42975 1.7761804 -0.0027572078 3.1225683e-06 -1.3107969e-09) (1000-5000: 1019.2299 0.95857389 -0.00038250616 7.0786873e-08 -4.9105261e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	29.01834
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	43516831
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	224528.15
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 830.42975 1.7761804 -0.0027572078 3.1225683e-06 -1.3107969e-09) (1000-5000: 1019.2299 0.95857389 -0.00038250616 7.0786873e-08 -4.9105261e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	29.01834
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	43516831
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	224528.15
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 750.64746 1.2586592 -0.0009549455 5.9301684e-07 -2.037611e-10) (1000-5000: 1025.7778 0.53686973 -0.00013371124 1.5396699e-08 -7.1568424e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	33.00674
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	10455847
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	228992.05
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1531.1577 -0.851299 0.0012581269 -8.3294264e-07 2.0218614e-10) (1000-5000: 1321.021 -0.014317108 -1.6124204e-06 2.3650336e-09 -2.2699264e-13)

Molecular Weight	kg/kgmol	constant	15.9994
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.49195e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	160943.58
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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

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

Material: (CO2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.93022 1.8744798 -0.0019664917 1.2972557e-06 -3.9999695e-10) (1000-5000: 841.37933 0.59324115 -0.00024151756 4.5227419e-08 -3.153141e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.0098
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9354283e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213734.59
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.39484 0.44879012 -0.0011522231 1.656891e-06 -7.3464085e-10) (1000-5000: 897.9353 0.4282339 -0.0001671401 3.0234596e-08 -2.0513808e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0104
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053974e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197546.27
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.0818 1.6037598 -0.0029327939 3.2161116e-06 -1.1568305e-09) (1000-5000: 1233.2377 1.4105281 -0.00040291547 5.5427906e-08 -2.949834e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01528
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.4184276e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188713.27
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (CH4-inerte . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5915 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000: 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04276
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74892973
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186057.77
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82638 0.29295803 -0.0001495637 3.4138851e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.7523 0.15941258 -3.2708853e-05 4.6127636e-09 -2.9528327e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-847.64045
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205041.62
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

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

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

Material: (CH4 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5915 9.0574851 -0.014425329 1.5805453e-05 -6.3431579e-09) (1000-5000: 872.48132 5.3055622 -0.0020083285 3.5167054e-07 -2.3339494e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04276
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74892973
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186057.77
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: methane-air (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species	names		((CH4 o2 CO2 h2o n2 CH4-inerte h2 co) () ())
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.045400001
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Absorption Coefficient	1/m	wsggm-domain-based	#f
Scattering Coefficient	1/m	constant	0
Scattering Phase Function		isotropic	#f
Refractive Index		constant	1
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.66790003
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 -0.0020082949 3.5166462e-07 -2.3339101e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.138
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04297 0.41796389 -0.0011762792 1.6743943e-06 -7.2562972e-10) (1000-5000: 868.62292 0.44162953 -0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.013399
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0

Standard State Entropy j/kgmol-k constant 191494.8  
 Reference Temperature k constant 298.14999  
 Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.5542
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.0767 1.6037546 -0.0029327841 3.2161008e-06 -1.1568267e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 -0.0004029141 5.5427719e-08 - 2.949824e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.015341
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.418379e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188696.44
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.7878
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.92889 1.8744735 -0.0019664851 1.2972514e-06 -3.9999562e-10) (1000-5000: 841.37646 0.59323931 -0.00024151675 4.5227278e-08 -3.1531301e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.009949
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9353235e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.2999
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82647 0.29295801 -0.00014956371 3.4138849e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.75234 0.15941258 -3.2708852e-05 4.6127648e-09 -2.9528324e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205026.86
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.6679
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5847 9.0573346 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.3430511e-09) (1000-5000: 872.46708 5.3054727 -0.002008295 3.5166462e-07 - 2.3339102e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: aluminum (solid)

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

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.08189
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.452 3.4023168 -0.0033584233 -3.9079528e-07 1.7053451e-09) (1000-5000: 12337.526 2.8872753 -0.00023235597 -3.8073793e-08 6.5277423e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130579.06
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.1233
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 968.38986 0.44878771 -0.0011522171 1.6568822e-06 -7.34637e-10) (1000-5000: 897.93053 0.42823161 -0.00016713923 3.0234435e-08 -2.05137e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.01055
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053956e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197531.64
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Cell Zone Conditions

Zones

name	id	type
zone1	44	fluid

Setup Conditions

zone1

Condition	Value
Material Name	pdf-mixture
Specify source terms?	no
Source Terms	((mass) (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum) (k) (epsilon) (species-0) (species-1) (species-2) (species-3) (species-4) (species-5) (species-6) (energy))
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Fixed Values	((x-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (y-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (z-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (k (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (epsilon (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-0 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-1 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-2 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-3 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-4 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-5 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-6 (inactive . #f) (constant . 0) (profile ))

(constant . 0) (profile )) (species-5 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-6 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (temperature (inactive . #f) (constant . 0) (profile )))

```

Frame Motion?                no
Relative To Cell Zone        -1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)      0
Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)    0
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)    0
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)    0
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (m) 0
Reference Frame Y-Origin of Rotation-Axis (m) 0
Reference Frame Z-Origin of Rotation-Axis (m) 0
Reference Frame X-Component of Rotation-Axis 0
Reference Frame Y-Component of Rotation-Axis 0
Reference Frame Z-Component of Rotation-Axis 1
Reference Frame User Defined Zone Motion Function none
Mesh Motion?                no
Relative To Cell Zone        -1
Moving Mesh Rotation Speed (rad/s)          0
Moving Mesh X-Velocity Of Zone (m/s)        0
Moving Mesh Y-Velocity Of Zone (m/s)        0
Moving Mesh Z-Velocity Of Zone (m/s)        0
Moving Mesh X-Origin of Rotation-Axis (m)    0
Moving Mesh Y-Origin of Rotation-Axis (m)    0
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (m)    0
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis    0
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis    0
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis    1
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function none
Participates in radiation                yes
Deactivated Thread                       no
Laminar zone?                            no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone? yes
Embedded Subgrid-Scale Model              0
Momentum Spatial Discretization           0
Cwale                                      0.325
Cs                                         0.1
Porous zone?                              no
Conical porous zone?                      no
X-Component of Direction-1 Vector          1
Y-Component of Direction-1 Vector          0
Z-Component of Direction-1 Vector          0
X-Component of Direction-2 Vector          0
Y-Component of Direction-2 Vector          1
Z-Component of Direction-2 Vector          0
X-Component of Cone Axis Vector            1
Y-Component of Cone Axis Vector            0
Z-Component of Cone Axis Vector            0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)     1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)     0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)     0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg) 0
Relative Velocity Resistance Formulation?   yes
Direction-1 Viscous Resistance (1/m2)      0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m2)      0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m2)      0
Choose alternative formulation for inertial resistance? no
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)      0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)      0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)      0
C0 Coefficient for Power-Law               0
C1 Coefficient for Power-Law               0
Porosity                                    1

```



Equilibrium Thermal Model (if no, Non-Equilibrium)?	yes
Non-Equilibrium Thermal Model?	no
Solid Material Name	aluminum
Interfacial Area Density (1/m)	1
Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	1

#### Boundary Conditions

-----

#### Zones

name	id	type
-----		
wall-1	45	wall
inner_inlet	47	velocity-inlet
outer_inlet	48	velocity-inlet
outlet	49	pressure-outlet

#### Setup Conditions

#### wall-1

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

Surface tension gradient (n/m-k)	0
Specularity Coefficient	0
Convective Augmentation Factor	1

inner\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	0.66
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	300
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	12
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.03
Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	1
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

outer\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0

Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	1200
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	7.4999998
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.032
Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	1
Mean Mixture Fraction	0
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

outlet

Condition	Value
-----	-----
Gauge Pressure (pascal)	0
Backflow Total Temperature (k)	300
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	2
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	5
Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	1
Mean Mixture Fraction	0
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no
Radial Equilibrium Pressure Distribution	no
Specify Average Pressure Specification	no
Specify targeted mass flow rate	no
Targeted mass flow (kg/s)	1
Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	5000000
Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	1

Solver Settings

-----

Equations

Equation	Solved
-----	-----
Flow	yes
Turbulence	yes

Energy    yes  
P1        yes  
Pdf       yes

Numerics

Numeric                    Enabled  
-----  
Absolute Velocity Formulation    yes

Relaxation

Variable	Relaxation Factor
-----	-----
Pressure	0.3
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.60000002
Turbulent Kinetic Energy	0.69999999
Turbulent Dissipation Rate	0.69999999
Turbulent Viscosity	0.89999998
Energy	1
Temperature	0.95999998
P1	1
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0.9

Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Reduction Tolerance
-----	-----	-----	-----
Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	0.7
P1	Flexible	0.1	0.7
Mean Mixture Fraction	Flexible	0.1	0.7
Mixture Fraction Variance	Flexible	0.1	0.7

Pressure-Velocity Coupling

Parameter    Value  
-----  
Type        SIMPLE

Discretization Scheme

Variable	Scheme
-----	-----
Pressure	Second Order
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
Energy	First Order Upwind
Mean Mixture Fraction	First Order Upwind
Mixture Fraction Variance	First Order Upwind

Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	290
Maximum Temperature	5000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000

## Modelo EDC con NOx

Fluent

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

Release: 14.5.7

Title:

Models

-----

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	RNG k-epsilon turbulence model
Wall Treatment	Standard Wall Functions
RNG Differential Viscosity Model	Disabled
RNG Swirl Dominated Flow Option	Enabled
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	None
Species	Reacting (8 species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Enabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

Material Properties

-----

Material: methane-air (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species		names	((CH4 o2 CO2 h2o n2 CH4-inerte h2 co) () ())
Reaction		finite-rate	((reaction-1 ((CH4 1 0.5 1) (o2 0.5 1.25 1)) ((co 1 0 1) (h2 2 0 1)) ((CO2 0 1) (h2o 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1)) (stoichiometry 1CH4 + 0.5o2 --> 1co + 2h2) (arrhenius 7.82e+13 1.254e+08 0) (mixing-rate 0 0) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-2 ((CH4 1 1 1) (h2o 1 1 1)) ((co 1 0 1) (h2 3 0 1)) ((o2 0 1) (CO2 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1)) (stoichiometry 1CH4 + 1h2o --> 1co + 3h2) (arrhenius 3e+11 1.254e+08 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-3 ((h2 1 0.25 1) (o2 0.5 1.5 1)) ((h2o 1 0 1)) ((CH4 0 1) (CO2 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1) (co 0 1)) (stoichiometry 1h2 + 0.5o2 --> 1h2o) (arrhenius 1.209e+18 1.672e+08 -1) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)) (reaction-4 ((co 1 1 1) (h2o 1 1 1)) ((CO2 1 0 1) (h2 1 0 1)) ((CH4 0 1) (o2 0 1) (n2 0 1) (CH4-inerte 0 1)) (stoichiometry 1co + 1h2o --> 1CO2 + 1h2) (arrhenius 2.75e+12 83600000 0) (mixing-rate 4 0.5) (use-third-body-efficiencies? . #f)))
Mechanism		reaction-mechs	((mechanism-1 (reaction-type . volumetric) (reaction-list reaction-1 reaction-2 reaction-3 reaction-4) (site-info)))
Density	kg/m3	incompressible-ideal-gas	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.045400001
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Mass Diffusivity	m2/s	constant-dilute-appx	(2.8799999e-05)
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 -0.0020082949 3.5166462e-07 - 2.3339101e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: methane-inerte (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.66790003
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.58469 9.0573349 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.343051e-09) (1000-5000: 872.4671 5.3054729 -0.0020082949 3.5166462e-07 - 2.3339101e-11)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.033199999
Viscosity	kg/m-s	constant	1.087e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 979.04297 0.41796389 -0.0011762792 1.6743943e-06 -7.2562972e-10) (1000-5000: 868.62292 0.44162953 -0.00016872295 2.9967875e-08 -2.0043858e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.013399
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191494.8
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1563.0767 1.6037546 -0.0029327841 3.2161008e-06 -1.1568267e-09) (1000-5000: 1233.2338 1.4105233 -0.0004029141 5.5427719e-08 - 2.949824e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.015341
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.418379e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188696.44
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 429.92889 1.8744735 -0.0019664851 1.2972514e-06 -3.9999562e-10) (1000-5000: 841.37646 0.59323931 -0.00024151675 4.5227278e-08 -3.1531301e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.009949
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9353235e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213720.2

Reference Temperature k constant 298.14999  
 Speed of Sound m/s none #f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 834.82647 0.29295801 -0.00014956371 3.4138849e-07 -2.2783585e-10) (1000-5000: 960.75234 0.15941258 -3.2708852e-05 4.6127648e-09 -2.9528324e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205026.86
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5847 9.0573346 -0.014425086 1.5805188e-05 -6.3430511e-09) (1000-5000: 872.46708 5.3054727 -0.002008295 3.5166462e-07 -2.3339102e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04303
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74895176
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186040.09
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: air (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.225
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(100-1000: 1161.4821 -2.368819 0.014855111 -5.0349092e-05 9.9285693e-08 -1.1110966e-10 6.5401962e-14 -1.5735877e-17) (1000-3000: -7069.814 33.706051 -0.058127593 5.4216154e-05 -2.9366788e-08 9.2375335e-12 -1.5655534e-15 1.1123348e-19)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0242
Viscosity	kg/m-s	constant	1.7894001e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.966
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	194336
Reference Temperature	k	constant	298.14999
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: aluminum (solid)

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

Material: carbon-monoxide (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.1233



Cp (Specific Heat) j/kg-k polynomial (300-1000: 968.38986 0.44878771 -0.0011522171  
 1.6568822e-06 -7.34637e-10) (1000-5000: 897.93053 0.42823161 -0.00016713923 3.0234435e-08 -  
 2.05137e-12)  
 Thermal Conductivity w/m-k constant 0.025  
 Viscosity kg/m-s constant 1.75e-05  
 Molecular Weight kg/kgmol constant 28.01055  
 Standard State Enthalpy j/kgmol constant -1.1053956e+08  
 Standard State Entropy j/kgmol-k constant 197531.64  
 Reference Temperature k constant 298.15  
 Thermal Expansion Coefficient 1/k constant 0  
 Speed of Sound m/s none #f

Material: hydrogen (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	0.08189
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.452 3.4023168 -0.0033584233 - -3.9079528e-07 1.7053451e-09) (1000-5000: 12337.526 2.8872753 -0.00023235597 -3.8073793e-08 6.5277423e-12)
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.1672
Viscosity	kg/m-s	constant	8.411e-06
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130579.06
Reference Temperature	k	constant	298.15
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 13602.452 3.4023168 -0.0033584233 - 3.9079528e-07 1.7053451e-09) (1000-5000: 12337.526 2.8872753 -0.00023235597 -3.8073793e-08 6.5277423e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	0
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130579.06
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

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

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

Cell Zone Conditions

-----

Zones

name id type

-----

zone1 44 fluid

Setup Conditions

zone1

Condition	Value
Material Name	methane-air
Specify source terms?	no
Source Terms	((mass) (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum)
(k) (epsilon) (species-0) (species-1) (species-2) (species-3) (species-4) (species-5) (species-6) (energy))	
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Fixed Values	((x-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (y-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (z-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (k (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (epsilon (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-0 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-1 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-2 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-3 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-4 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-5 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (species-6 (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (temperature (inactive . #f) (constant . 0) (profile )))
Frame Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)	0
Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Reference Frame X-Component of Rotation-Axis	0
Reference Frame Y-Component of Rotation-Axis	0
Reference Frame Z-Component of Rotation-Axis	1
Reference Frame User Defined Zone Motion Function	none
Mesh Motion?	no
Relative To Cell Zone	-1
Moving Mesh Rotation Speed (rad/s)	0
Moving Mesh X-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh Y-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh Z-Velocity Of Zone (m/s)	0
Moving Mesh X-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis	0
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis	0
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis	1
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function	none
Deactivated Thread	no
Laminar zone?	no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone?	yes
Embedded Subgrid-Scale Model	0
Momentum Spatial Discretization	0
Cwale	0.325
Cs	0.1
Porous zone?	no
Conical porous zone?	no
X-Component of Direction-1 Vector	1
Y-Component of Direction-1 Vector	0
Z-Component of Direction-1 Vector	0
X-Component of Direction-2 Vector	0
Y-Component of Direction-2 Vector	1

Z-Component of Direction-2 Vector	0
X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	yes
Direction-1 Viscous Resistance (1/m2)	0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m2)	0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m2)	0
Choose alternative formulation for inertial resistance?	no
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
C0 Coefficient for Power-Law	0
C1 Coefficient for Power-Law	0
Porosity	1
Equilibrium Thermal Model (if no, Non-Equilibrium)?	yes
Non-Equilibrium Thermal Model?	no
Solid Material Name	aluminum
Interfacial Area Density (1/m)	1
Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	1
Reaction Mechanism	0
Activate reaction mechanisms?	yes
Surface-Volume-Ratio (1/m)	0

#### Boundary Conditions

-----

#### Zones

name	id	type
-----		
wall-1	45	wall
inner_inlet	47	velocity-inlet
outer_inlet	48	velocity-inlet
outlet	49	pressure-outlet

#### Setup Conditions

##### wall-1

Condition	Value
-----	
Wall Thickness (m)	0
Heat Generation Rate (w/m3)	0
Material Name	aluminum
Thermal BC Type	1
Temperature (k)	300
Heat Flux (w/m2)	0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0
Free Stream Temperature (k)	300
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	0
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
Apply a rotational velocity to this wall?	no
Velocity Magnitude (m/s)	0
X-Component of Wall Translation	1
Y-Component of Wall Translation	0

Z-Component of Wall Translation	0
Define wall velocity components?	no
X-Component of Wall Translation (m/s)	0
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0
External Emissivity	1
External Radiation Temperature (k)	300
Wall Roughness Height (m)	0
Wall Roughness Constant	0.5
	(0)
	((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0)	
(profile ))	
Rotation Speed (rad/s)	0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
X-Component of Rotation-Axis Direction	0
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
X-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0
Fslip constant	0
Eslip constant	0
Surface tension gradient (n/m-k)	0
Specularity Coefficient	0
Convective Augmentation Factor	1

inner\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	0.66
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	300
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	12
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.03
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no

(((constant . 0.281) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.719) (profile )) ((constant . 0) (profile ))

Pollutant NO Mass Fraction 0  
 is zone used in mixing-plane model? no

outer\_inlet

Condition	Value
Velocity Specification Method	2
Reference Frame	0
Velocity Magnitude (m/s)	1.54
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Coordinate System	0
X-Velocity (m/s)	0
Y-Velocity (m/s)	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Angular velocity (rad/s)	0
Temperature (k)	1200
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	7.4999998
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.032
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no

(((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.22) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0.78) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile ))

Pollutant NO Mass Fraction 0  
 is zone used in mixing-plane model? no

outlet

Condition	Value
Gauge Pressure (pascal)	0
Backflow Total Temperature (k)	300
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	2
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1

Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	5
Backflow Turbulent Length Scale (m)	1
Backflow Hydraulic Diameter (m)	1
Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no
Backflow	((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile ))
Backflow Pollutant NO Mass Fraction	0
is zone used in mixing-plane model?	no
Radial Equilibrium Pressure Distribution	no
Specify Average Pressure Specification	no
Specify targeted mass flow rate	no
Targeted mass flow (kg/s)	1
Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	5000000
Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	1

### Solver Settings

-----

#### Equations

Equation	Solved
Flow	no
Turbulence	no
CH4	no
o2	no
CO2	no
h2o	no
n2	no
CH4-inerte	no
h2	no
Pollutant	no yes
Energy	no

#### Numerics

Numeric	Enabled
---------	---------

-----

Absolute Velocity Formulation	yes
-------------------------------	-----

#### Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Pressure	0.3
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.60000002
Turbulent Kinetic Energy	0.69999999
Turbulent Dissipation Rate	0.69999999
Turbulent Viscosity	0.89999998
CH4	0.89999998
o2	0.89999998
CO2	0.89999998
h2o	0.89999998
n2	0.89999998
CH4-inerte	1
h2	1
Pollutant no	1

Energy 0.95999998

#### Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Reduction Tolerance
Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
CH4	Flexible	0.1	0.7
o2	Flexible	0.1	0.7
CO2	Flexible	0.1	0.7
h2o	Flexible	0.1	0.7
n2	Flexible	0.1	0.7
CH4-inerte	Flexible	0.1	0.7
h2	Flexible	0.1	0.7
Pollutant no	Flexible	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	0.7

#### Pressure-Velocity Coupling

Parameter Value  
-----  
Type SIMPLE

#### Discretization Scheme

Variable	Scheme
Pressure	Second Order
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
CH4	Second Order Upwind
o2	Second Order Upwind
CO2	Second Order Upwind
h2o	Second Order Upwind
n2	Second Order Upwind
CH4-inerte	Second Order Upwind
h2	Second Order Upwind
Pollutant no	First Order Upwind
Energy	Second Order Upwind

#### Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	290
Maximum Temperature	5000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000