



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIERÍA  
INDUSTRIAL VALENCIA

**TRABAJO FIN DE MASTER EN INGENIERÍA INDUSTRIAL**

# **ANÁLISIS DE LA COMBUSTIÓN EN UN QUEMADOR DE TURBINA DE GAS MEDIANTE LA APLICACIÓN DEL MODELADO CFD**

AUTOR: LORENZO LUIS GÓMEZ-ARIAS MATEOS

TUTOR: JOSÉ MARÍA GARCÍA OLIVER

**Curso Académico: 2020-21**



## **AGRADECIMIENTOS**

A los profesores José María García Oliver y José Manuel Pastor Enguádanos, por su implicación y por ayudarme a potenciar el ingenio y la imaginación durante la elaboración del presente proyecto; por hacer que este mundo de la combustión no resulte tan complejo para mí.

A los doctorandos Iván y David, por su apoyo durante la elaboración de las rutinas de Matlab, sin vuestra ayuda esto tampoco habría sido posible.

A mi familia, por confiar en mí y alentarme durante estos duros años de formación académica; por hacerme sentir como en casa aun estando lejos, por vuestro cariño y apoyo incondicional.

En especial, quiero dedicar este trabajo a mi abuela Provi, por ser la persona más importante de mi vida. Gracias por cuidar siempre de mí y por llenar mi vida de felicidad. No nos faltes nunca.



## RESUMEN

En este TFM se lleva a cabo el análisis de la combustión en un quemador de turbina de gas mediante la aplicación del modelado de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Dada la complejidad y coste económico que supone trabajar con cámaras de combustión de turbinas de gas reales, se va a emplear el quemador académico KIAI de CORIA para las simulaciones CFD.

Debido a la normativa medioambiental existente, focalizada en reducir las emisiones contaminantes, se va a hacer uso de un quemador basado en el concepto Lean Direct Injection (LDI), centrado en reducir las emisiones NO<sub>x</sub> de la combustión.

El cálculo CFD de las simulaciones se va a llevar a cabo mediante CONVERGE, considerando el planteamiento RANS para modelar la turbulencia. A partir del caso inerte, se acondicionará la ignición de la mezcla y se seleccionará un mecanismo cinético-químico reducido para optimizar los tiempos de cálculo.

Finalmente, se analizará la combustión mediante la configuración de una estrategia de postprocesado, a partir de la cual se obtendrán los campos de velocidad, temperatura y las especies generadas por los procesos de combustión.

**Palabras clave:** turbina de gas, combustión, Lean Direct Injection (LDI), Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), CONVERGE, quemador KIAI

## RESUM

En este TFM es du a terme l'anàlisi de la combustió en un cremador de turbina de gas mitjançant l'aplicació del modelatge de la Dinàmica de Fluids Computacional (CFD). Donada la complexitat i cost econòmic que suposa treballar amb cambres de combustió de turbines de gas reals, es va a emprar el cremador acadèmic KIAI de CORIA per a les simulacions CFD.

A causa de la normativa mediambiental existent, focalitzada a reduir les emissions contaminants, es va a fer ús d'un cremador basat en el concepte de Lean Direct Injection (LDI), centrat en reduir les emissions NOx de la combustió.

El càlcul CFD de les simulacions es va a dur a terme mitjançant el codi CONVERGE, considerant el plantejament RANS per a modelar la turbulència. A partir del cas inert, es condicionarà la ignició de la mescla i es seleccionarà un mecanisme cinètic-químic reduït per a optimitzar els temps de càlcul.

Finalment, s'analitzarà la combustió mitjançant la configuració d'una estratègia de postprocessament, a partir de la qual s'obtidran els camps de velocitat, temperatura i les espècies generades pels processos de combustió.

**Paraules clau:** turbina de gas, combustió, Lean Direct Injection (LDI), Dinàmica de Fluids Computacional (CFD), CONVERGE, cremador KIAI

## **ABSTRACT**

In this TFM, the analysis of combustion in a gas turbine burner is carried out by applying Computational Fluid Dynamics (CFD) modeling. Given the complexity and economic cost of working with real gas turbine combustion chambers, CORIA's KIAI academic burner will be used for CFD simulations.

Due to existing environmental regulations, focused on reducing polluting emissions, the Lean Direct Injection (LDI) concept will be used, focused on reducing NOx emissions from combustion.

The CFD calculation of the simulations will be carried out using CONVERGE, considering the RANS approach for turbulence modelling. From the inert case, the ignition of the mixture will be conditioned and a reduced kinetic-chemical mechanism will be selected to optimize the calculation times.

Finally, combustion will be analyzed by configuring a post-processing strategy, from which the fields of speed, temperature and the species generated by the combustion processes will be obtained.

**Key words:** gas turbine, combustion, Lean Direct Injection (LDI), Computational Fluid Dynamics (CFD), CONVERGE, KIAI burner





# ÍNDICE

## DOCUMENTOS CONTENIDOS EN EL TFM

- Memoria
- Presupuesto

## ÍNDICE DE LA MEMORIA

<b>CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN</b> .....	<b>1</b>
1.1 CONTEXTO GENERAL .....	1
1.1.1 Impacto ambiental de las aeronaves .....	2
1.1.2 Reducción de emisiones contaminantes.....	3
1.2 PLANTEAMIENTO Y OBJETIVOS .....	4
<b>CAPÍTULO 2: PRINCIPIOS DE LA COMBUSTIÓN EN QUEMADORES TURBINA DE GAS</b> .....	<b>5</b>
2.1 PRINCIPIO DE FUNCIONAMIENTO .....	5
2.2 CONFIGURACIÓN DE LA CÁMARA DE COMBUSTIÓN .....	6
2.2.1 Difusor .....	7
2.2.2 Swirler.....	7
2.2.3 Inyector .....	10
2.3 PRODUCTOS DE LA COMBUSTIÓN .....	12
2.3.1 Mecanismos de formación de NO <sub>x</sub> .....	13
2.4 QUEMADORES TURBINA DE GAS CON BAJAS EMISIONES .....	14
2.4.1 Rich Burn/Quick-Quench/Lean-Burn (RQL).....	14
2.4.2 Lean Premixed Combustion (LPM) .....	15
2.4.3 Lean Direct Injection.....	16
<b>CAPÍTULO 3: MODELADO MEDIANTE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)</b> .....	<b>17</b>
3.1 INTRODUCCIÓN .....	17
3.2 ECUACIONES FUNDAMENTALES.....	17



3.2.1 Ecuación de continuidad .....	18
3.2.2 Ecuación de conservación de especies.....	18
3.2.3 Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento .....	19
3.2.4 Ecuación de conservación de la energía .....	19
3.2.5 Ecuaciones de estado .....	20
3.3 MODELOS DE TURBULENCIA .....	20
3.3.1 RANS .....	21
3.3.2 URANS .....	23
3.3.3 LES .....	23
3.3.4 DNS .....	28
3.4 MÉTODOS DE DISCRETIZACIÓN .....	28
3.4.1 Método de las diferencias finitas .....	28
3.4.2 Método de los elementos finitos (MEF) .....	29
3.4.3 Método de volúmenes finitos (FVM) .....	29
<b>CAPÍTULO 4: SETUP COMPUTACIONAL .....</b>	<b>31</b>
4.1 PREPROCESADO.....	31
4.1.1 Geometría del quemador KIAI.....	31
4.1.2 Software de cálculo CFD.....	33
4.1.3 Condiciones iniciales y de contorno .....	34
4.1.4 Estrategia de mallado de CONVERGE.....	34
4.1.5 Modelado del spray.....	36
4.1.6 Modelado de la turbulencia .....	37
4.2 MODELADO DE LA COMBUSTIÓN .....	38
4.3 SOLVER .....	40
4.3.1 Estrategia de cálculo.....	41
4.4 POSTPROCESADO .....	41
4.4.1 Variables de estudio .....	42
4.4.2 Rutina de postprocesado.....	43
<b>CAPÍTULO 5: RESULTADOS .....</b>	<b>49</b>
5.1 ANÁLISIS DEL CAMPO DE VELOCIDAD .....	49
5.2 ANÁLISIS DE LA TEMPERATURA Y ESPECIES .....	52
<b>CAPÍTULO 6: CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS .....</b>	<b>57</b>
<b>CAPÍTULO 7: BIBLIOGRAFÍA .....</b>	<b>59</b>

## ÍNDICE DEL PRESUPUESTO

<b>PRESUPUESTO DEL TFM</b> .....	<b>65</b>
1. INTRODUCCIÓN .....	65
2. PRESUPUESTO PARCIAL DE RECURSOS HUMANOS.....	66
3. PRESUPUESTO PARCIAL DE RECURSOS INFORMÁTICOS .....	67
3.1 Licencias.....	67
3.2 Equipos de cómputo.....	67
3.3 Simulaciones y consumo eléctrico .....	68
4. PRESUPUESTO PARCIAL DE COSTES GENERALES .....	69
5. PRESUPUESTO TOTAL DEL TFM .....	70

## ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 1. Emisiones NOx según medio de transporte [4] .....</i>	<i>2</i>
<i>Figura 2. Problemas de salud según tiempo de exposición y cantidad de CO en sangre [6].....</i>	<i>3</i>
<i>Figura 3. Elementos del motor turbina de gas [11].....</i>	<i>5</i>
<i>Figura 4. Esquema de una cámara de combustión convencional [13] .....</i>	<i>6</i>
<i>Figura 5. Swirler de geometría axial [15] .....</i>	<i>8</i>
<i>Figura 6. Zona de recirculación del flujo a la salida del swirler [16] .....</i>	<i>8</i>
<i>Figura 7. Configuraciones axial y radial para el swirler [18] .....</i>	<i>10</i>
<i>Figura 8. Esquema del sistema de inyección Pressure Swirl Atomiser [21] .....</i>	<i>11</i>
<i>Figura 9. Esquema del inyector Air-blast Atomiser [22].....</i>	<i>12</i>
<i>Figura 10. Dependencia de la temperatura adiabática de llama con el dosado relativo [26] .....</i>	<i>14</i>
<i>Figura 11. Rich Burn/Quick-Quench/Lean-Burn (RQL) [27].....</i>	<i>15</i>
<i>Figura 12. Zonas de recirculación típicas del esquema LDI [30].....</i>	<i>16</i>
<i>Figura 13. Espectro de energía cinética turbulenta [32].....</i>	<i>21</i>
<i>Figura 14. Capas de la Ley de la Pared [37] .....</i>	<i>27</i>
<i>Figura 15. Volúmenes de control [40] .....</i>	<i>30</i>
<i>Figura 16. Geometría del quemador KIAI [41] .....</i>	<i>31</i>
<i>Figura 17. Perspectiva del dominio computacional del quemador CORIA .....</i>	<i>32</i>
<i>Figura 18. Swirler del quemador KIAI [41] .....</i>	<i>32</i>
<i>Figura 19. Esquema de inyección del n-heptano en el quemador KIAI [41] .....</i>	<i>33</i>
<i>Figura 20. Emblema del software comercial CONVERGE .....</i>	<i>34</i>
<i>Figura 21. Refinamiento de la geometría KIAI con las herramientas de mallado de CONVERGE [41].....</i>	<i>36</i>
<i>Figura 22. Fenómenos de atomización primaria y secundaria [45] .....</i>	<i>36</i>
<i>Figura 23. Configuración del modelo de turbulencia RANS para el submodelo k-ε RNG .....</i>	<i>37</i>
<i>Figura 24. Tiempos de retraso en la ignición para autoencendido en 1, 10 y 50 atm.....</i>	<i>39</i>
<i>Figura 25. Esquema iterativo del algoritmo PISO [34] .....</i>	<i>40</i>
<i>Figura 26. Timeline de la estrategia de mallado durante la simulación .....</i>	<i>41</i>

Figura 27. Estaciones radiales para las cinco posiciones axiales [41] .....	42
Figura 28. Herramienta de conversión de extensiones de CONVERGE.....	43
Figura 29. Variables predispuestas en Column Format .col .....	43
Figura 30. Inputs de Matlab para lectura de archivo .col .....	44
Figura 31. Estaciones axiales y variables que se desean graficar .....	44
Figura 32. Coordenadas que definen los planos de estudio .....	45
Figura 33. Bucles for e interpolación de los datos.....	46
Figura 34. Estructura concatenada para importar y leer el archivo .col .....	46
Figura 35. Estructura de "plotting" de gráficas de resultados .....	47
Figura 36. Función plot_var para el plotting de gráficas de resultados.....	47
Figura 37. Componentes medias de la velocidad de la fase gas en la dirección axial para los casos inerte (izquierda) y reactivo (derecha) .....	50
Figura 38. Componentes fluctuantes de la velocidad de la fase gas en la dirección axial para los casos inerte (izquierda) y reactivo (derecha) .....	50
Figura 39. Estaciones axiales para la componente media de la velocidad axial del caso inerte .....	51
Figura 40. Estaciones axiales para la componente media de la velocidad axial del caso reactivo .....	51
Figura 41. Combustión del quemador KIAI con llama generada en la CTRZ .....	52
Figura 42. Temperatura y fracción másica de OH para el caso reactivo definitivo.....	53
Figura 43. Evolución de la temperatura en las estaciones axiales para el caso reactivo.....	53
Figura 44. Dosado relativo a lo largo del quemador.....	54
Figura 45. Componentes medias y fluctuantes de la temperatura para el caso reactivo .....	55
Figura 46. Especies CO <sub>2</sub> y vapor de agua H <sub>2</sub> O productos de la combustión .....	56
Figura 47. Especies menores intermedias de CO y CH <sub>2</sub> O.....	56

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Ecuaciones adicionales según el modelo de turbulencia RANS .....	22
Tabla 2. Small Skeletal Mechanisms y número de especies y reacciones .....	38

# Documento 1:

# MEMORIA



# CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

## 1.1 CONTEXTO GENERAL

Tras la Primera Guerra Mundial, entre 1918 y 1939 tuvo lugar *La era de oro de la aviación*, época en la se produjo un acelerón tecnológico con la aparición de los primeros motores a reacción. La invención del motor turbina de gas consiguió ofrecer una potencia considerablemente mayor que la que ofrecían los turbohélices de la época, aunque con un consumo mayor. La mejora de la potencia era inmediata, sin embargo, los ingenieros del momento tuvieron gran dificultad para incrementar el empuje, por lo que los objetivos de desarrollo tecnológico se centraban principalmente en reducir tanto el peso como las dimensiones del motor, logrando así un empuje mayor, y con ello vuelos de mayor altitud, lo que hacía unas aeronaves más competentes para afrontar los conflictos bélicos del momento.

En la década de los 80, con la crisis del petróleo, el precio del combustible se encareció notablemente, por lo que las mejoras tecnológicas se centraban principalmente en la eficiencia y en la optimización del consumo de combustibles.

En cambio, no fue hasta la década de los 90, tras el Protocolo de Montreal y con el Protocolo de Kioto, cuando se tomó conciencia de la gran cantidad de gases de efecto invernadero que se estaban vertiendo a la atmósfera, junto con problemas que ello suponía, entre ellos la reducción masiva del espesor de la capa de ozono. Es por ello que la Organización de Aviación Civil Internacional (OACI) comenzó a regular las principales emisiones contaminantes provenientes de los productos de la combustión, como son el hollín, los óxidos de nitrógeno (NOx), el monóxido de carbono (CO) y los hidrocarburos sin quemar (UHC) [1].

A partir de entonces, la industria aeronáutica comenzó a focalizar sus objetivos tecnológicos en el desarrollo de nuevas herramientas que permitieran optimizar el ciclo en los motores turbina de gas, consiguiendo mejores rendimientos y reduciendo de forma significativa las emisiones contaminantes. Entre las herramientas utilizadas, cabe destacar el uso de algoritmos y métodos numéricos mediante la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), la cual ha revolucionado completamente la investigación en los sistemas de combustión.

### 1.1.1 Impacto ambiental de las aeronaves

En la última década, el desarrollo acelerado del sector aéreo ha generado un notable crecimiento económico y social, de modo que el número de pasajeros se ha visto incrementado de manera considerable, situándose en 2019 con un tráfico en España de 275 millones de pasajeros, lo que supone un 40 % más respecto de 2012 [2]. Con la crisis sanitaria del Covid-19 esos valores han disminuido drásticamente, aunque se espera que se establezcan de nuevo para el año 2023.

Sin embargo, el incremento del número de vuelos desencadena importantes impactos ambientales tanto para la salud humana como el medioambiente. Como puede observarse en la Figura 1, las emisiones de NO<sub>x</sub> relativas al sector aéreo no son muy significativas en comparación con otros medios de transporte, sin embargo, en las inmediaciones de los aeropuertos habitualmente los NO<sub>x</sub> generan *smog fotoquímico*, mientras que a altitudes elevadas contribuyen en la formación del ozono troposférico [3].

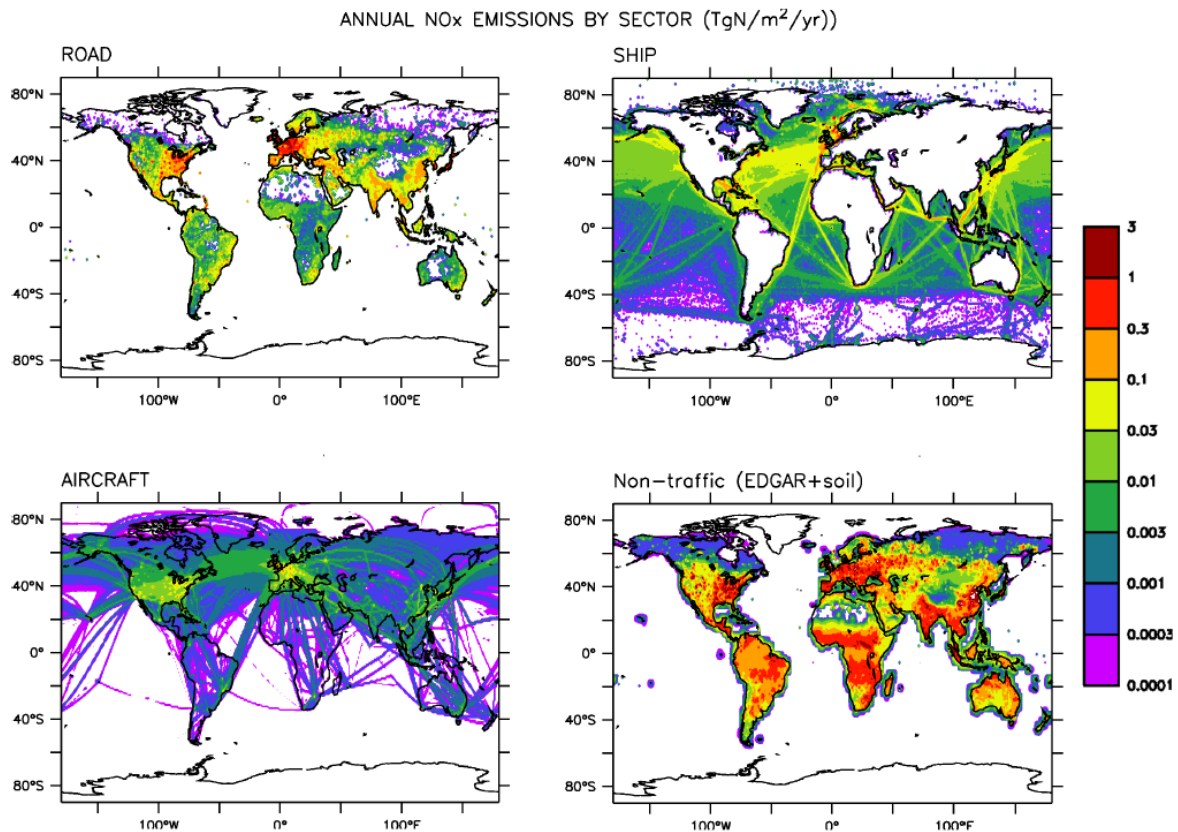


Figura 1. Emisiones NO<sub>x</sub> según medio de transporte [4]

Además, tal y como estudiaron Heitor y Whitelaw en [5], el origen de los principales contaminantes provenientes de motores de aviación suele estar relacionado con el modo de carga en el que opere el motor, de modo que, por ejemplo, el hollín suele generarse de forma más habitual en las operaciones de aterrizaje y despegue, mientras que en operaciones de baja potencia suelen predominar los



hidrocarburos sin quemar (UHC) y el monóxido de carbono (CO), como productos de combustiones incompletas con dosados normalmente ricos. El monóxido de carbono (CO) supone un gran problema en la salud de las personas, destacando la reducción de la capacidad de transporte de oxígeno en sangre, pudiendo ser mortal para bajas concentraciones de volumen de aire en tiempos reducidos de exposición como se observa en la Figura 2.

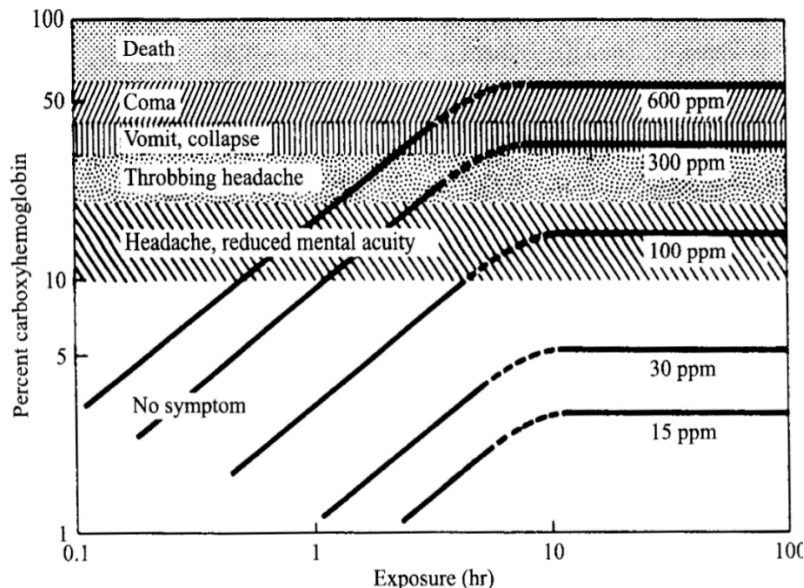


Figura 2. Problemas de salud según tiempo de exposición y cantidad de CO en sangre [6]

Por contrapartida, los óxidos de nitrógeno NO<sub>x</sub> suelen formarse en operaciones de carga con potencias elevadas, mientras que el dióxido de carbono CO<sub>2</sub>, por ser producto propio de la combustión, se produce a cualquier nivel de estado de carga. Debido a lo expuesto, uno de los desafíos más importantes en el diseño de motores turbina de gas se basa en analizar la combustión con tal de hacerla eficiente y reducir todo lo posible las emisiones contaminantes.

### 1.1.2 Reducción de emisiones contaminantes

Tal y como queda establecido en el *FlightPath 2050* por el Consejo Asesor para la Investigación e Innovación de Aviación en Europa (ACARE), para el año 2050 está prevista una reducción del 75 % en las emisiones de CO<sub>2</sub> por kilómetro y viajero, al igual que una reducción en el 90 % de NO<sub>x</sub> respecto al año 2000 [7].

Las emisiones de NO<sub>x</sub> en motores turbinas de gas suelen estar vinculadas al proceso de combustión de aire y combustible, por lo que una de las principales líneas de investigación se centra en el diseño de nuevas tecnologías que permitan una mejor mezcla y combustión. De ahí surge la idea de emplear el sistema de combustión LDI (Lean Direct Injection), mediante el cual se consiguen reducir satisfactoriamente las emisiones de NO<sub>x</sub>, convirtiéndolo en un sistema interesante de investigación futura para el desarrollo de motores turbina de gas, tal y como se verá en los próximos capítulos del presente TFM.

## 1.2 PLANTEAMIENTO Y OBJETIVOS

El presente Trabajo Final de Máster (TFM) tiene por objeto analizar la combustión en un quemador turbina de gas mediante el modelado de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). El sistema de combustión que se va a analizar es el Lean Direct Injection (LDI); con este sistema puede obtenerse una buena atomización del combustible en pequeñas gotas y aumentar así la superficie de contacto con el aire, garantizando un buen encendido, mejorando notablemente la eficiencia y reduciendo las emisiones NOx [8].

Debido a la gran complejidad y al elevado coste económico que supone trabajar con cámaras de combustión de turbinas de gas reales, suelen emplearse quemadores académicos donde se llevan a cabo los cálculos y simulaciones experimentales. Por ello, en el presente trabajo se van a realizar los cálculos referidos al quemador de geometría KIAI, perteneciente al proyecto CORIA [9].

Los cálculos a realizar se van a fundamentar en el empleo de códigos CFD, herramienta que permite obtener el estudio detallado de los procesos químicos y físicos que tienen lugar en los sistemas de combustión. Mediante el CFD se modelarán los flujos de aire y combustible en estado inerte dentro del quemador para poder analizar las etapas de postproceso correspondientes; seguidamente se provocará la adecuada ignición de la mezcla y se obtendrán los resultados para el flujo reactivo.

Este proyecto ha sido elaborado en colaboración con el Instituto Universitario CMT de Máquinas y Motores Térmicos de la Universitat Politècnica de València, en base a los fenómenos de atomización y evaporación que aparecen en la tesis doctoral realizada por Mario Belmar Gil.

El objetivo general del presente TFM es analizar la combustión, y con ello el flujo reactivo, en un quemador académico LDI mediante el modelado de la herramienta computacional CFD.

A continuación, se enumeran los objetivos específicos a alcanzar durante la elaboración del TFM:

- Situar en contexto al lector mediante la descripción de las diferentes tecnologías de motores turbina de gas para la reducción de emisiones NOx, como es la LDI. Se describirán los fundamentos del modelado CFD, métodos de discretización y los componentes principales que integran el quemador KIAI.
- Configuración del setup computacional de estudio para el modelo de turbulencia U-RANS y modelo de atomización TAB. Se establecerán las estrategias de mallado correspondientes y se seleccionará un mecanismo químico reducido para llevar a cabo la combustión.
- Acondicionamiento de la ignición al caso inerte y análisis de la combustión para el caso reactivo mediante las rutinas de postprocesado de Matlab y softwares de digitalización, como es Tecplot.

## CAPÍTULO 2: PRINCIPIOS DE LA COMBUSTIÓN EN QUEMADORES TURBINA DE GAS

### 2.1 PRINCIPIO DE FUNCIONAMIENTO

Un motor turbina de gas es una turbomáquina térmica que transforma la energía química contenida en el combustible en energía mecánica mediante la expansión de los gases de escape en los álabes de una turbina. El aire es recogido de la atmósfera y mediante un compresor es inyectado a alta presión y cierta temperatura en la cámara de combustión, donde ocurren los fenómenos de atomización- evaporación, mezcla y encendido, produciéndose la liberación de energía del combustible.

A la salida de la cámara de combustión se tiene aire comprimido, en forma de gases de escape, a muy elevada temperatura, donde es enviado a la turbina a alta velocidad, produciendo el movimiento del eje durante su paso a través de los escalonamientos (rotos y estator) de la misma, y generando de este modo un trabajo mecánico, empleado en accionar el compresor [10]. Finalmente, el aire sale por la tobera, produciendo una fuerza de reacción en sentido contrario. En la Figura 3 pueden observarse los principales elementos que componen un motor turbina de gas.

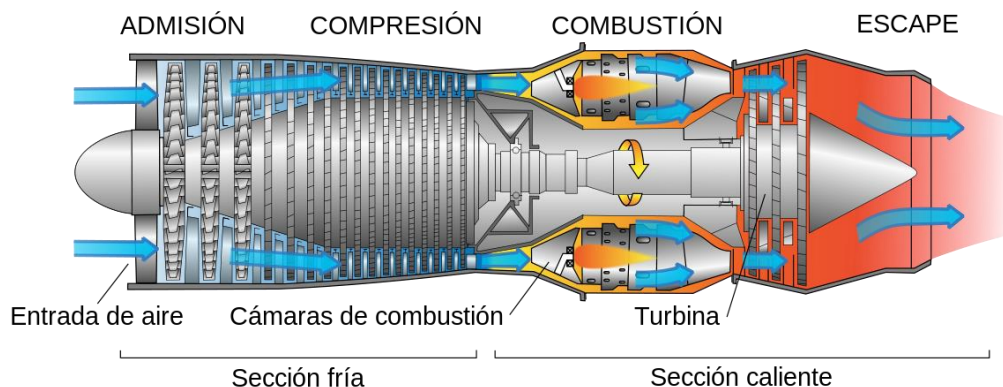


Figura 3. Elementos del motor turbina de gas [11]

## 2.2 CONFIGURACIÓN DE LA CÁMARA DE COMBUSTIÓN

Tras la salida del compresor, el aire que entra a la cámara de combustión lo hace a la presión establecida por la relación de compresión y a una temperatura determinada; además, por tratarse de aire comprimido, entra a una velocidad considerable en torno a 160 m/s. Si no se actuase sobre esa velocidad, al ser tan elevada, el propio aire arrastraría a las partículas atomizadas de combustible, de forma que el tiempo de residencia de éstas en la cámara de combustión sería tan pequeño, que no habría tiempo suficiente para una correcta atomización, mezcla e ignición. Por consiguiente, la velocidad del aire debe decelerarse hasta unos 25 m/s para que las partículas de combustible no escapen, y de este modo se obtenga una llama estabilizada debido a la baja velocidad axial dentro de la cámara [12].

Además, si de entrada se inyectase todo el aire en un único paso la llama presentaría mucha inestabilidad y tampoco prendería; por lo que en las cámaras de combustión convencionales se distinguen tres zonas de interés donde se reparte el aire, como se muestra en la Figura 4. Una zona primaria en la que se inyecta en torno al 20 % del aire, por lo que se trata de una zona rica en combustible donde se encuentra la llama principal y en la que se alcanzan las temperaturas adiabáticas de llama, produciendo generalmente hollín y óxidos de nitrógeno, como productos de combustión incompleta.

Seguidamente se inyecta otro 20 % como aire secundario para terminar la combustión, y, por último, se tiene la zona de dilución en la que se emplea el aire restante para controlar la temperatura de salida de la cámara y así no dañar los álabes de la turbina. En torno al 40 % del aire se emplea para refrigerar las paredes de la cámara de combustión, creando una camisa protectora [3].

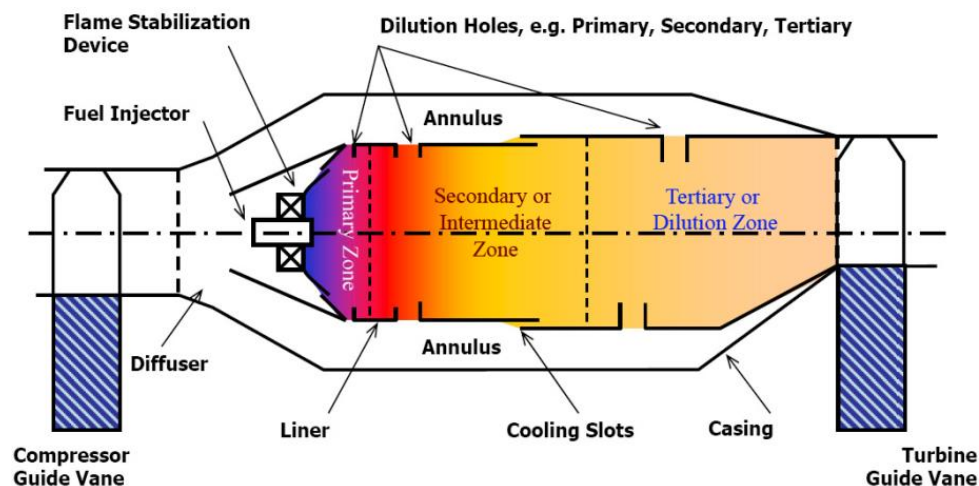


Figura 4. Esquema de una cámara de combustión convencional [13]

Por otra parte, es importante destacar las necesidades que ha de tener la cámara de combustión para su buen funcionamiento, y así tener un uso controlado de las emisiones contaminantes.

Según estudiaron Lefebvre y Ballal en [14], entre los requisitos más importantes que ha de tener la cámara de combustión de una turbina de gas destacan los siguientes:

- Minimizar la formación de partículas contaminantes.
- Asegurar el buen estado de los álabes de la turbina con temperaturas de entrada admisibles.
- Garantizar estabilidad en la ignición y máxima eficiencia en el proceso de combustión.
- Reducir las caídas de presión a lo largo de la cámara de combustión.
- Empleo de materiales capaces de resistir las temperaturas adiabáticas de llama, y así garantizar una buena fiabilidad y la vida útil del sistema en su conjunto.
- Evitar el apagado de llama con una buena estabilidad de la misma.

En este subcapítulo se van a describir las características más relevantes de los elementos que conforman la cámara de combustión en los motores turbina de gas, con el objetivo de conocer cómo se realiza la introducción del aire y la inyección del combustible dentro del quemador, y así asegurar un funcionamiento correcto del motor en un amplio rango de operación. A parte de los elementos que se van a mencionar, existen otros, pero carecen de importancia en el entorno en el que se desarrolla el presente trabajo.

### **2.2.1 Difusor**

Tal y como se ha visto, una de los requisitos de la cámara de combustión es minimizar la caída de presión del flujo de aire a través de esta, junto con la deceleración de la velocidad del aire para que no arrastre al combustible. La caída de presión es función de la energía liberada por el combustible y que absorbe el gas, de su densidad y de las temperaturas de entrada  $T_3$  y salida  $T_4$  de la cámara de combustión, según la ecuación (2.1) [14].

$$\Delta P = 0.5\rho U^2 \left( \frac{T_4}{T_3} - 1 \right) \quad (2.1)$$

Para minimizar las pérdidas de presión y con el fin de adaptar el aire a la velocidad de entrada correspondiente se emplea del difusor. Este elemento consiste en un conducto de sección divergente que se encuentra a la salida del compresor y a la entrada de la cámara; debe estar diseñado de forma que sea lo más corto y ligero posible y que además sea capaz de transformar la energía cinética que lleva el gas en energía estática de presión.

### **2.2.2 Swirler**

El *swirler* es un elemento fundamental en los sistemas de combustión en los que se persigue una reducción de las emisiones contaminantes. Se trata de una geometría, como la mostrada en la Figura 5, que permite mejorar la estabilidad de la llama y favorecer la mezcla entre el aire y el combustible.

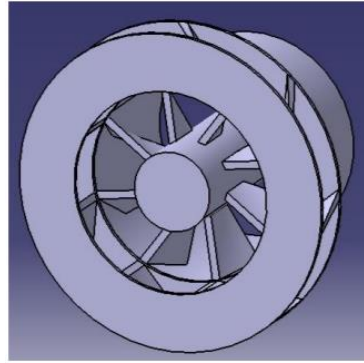


Figura 5. Swirler de geometría axial [15]

El *swirler*, mediante su geometría de palas, permite la creación de una zona de recirculación del flujo, generando un campo de velocidades con componentes negativas en la dirección axial, lo que evita el desprendimiento de la llama y favorece la transmisión de calor por difusión favoreciendo la ignición de la mezcla fresca que entra en el quemador. La estabilidad de la llama es debida a la zona de recirculación creada, como se observa en la Figura 6, y generalmente aparece para números de *swirl* elevados [16].

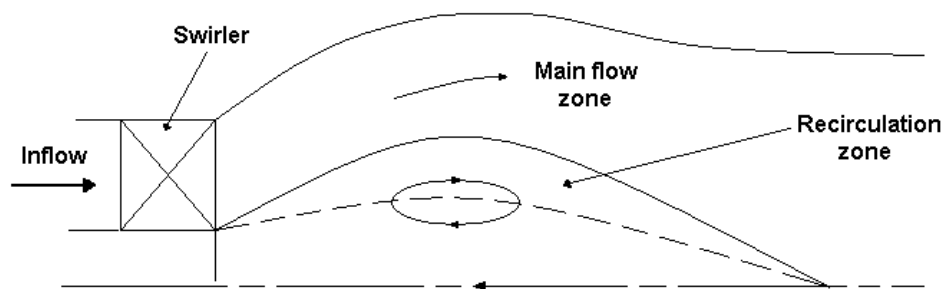


Figura 6. Zona de recirculación del flujo a la salida del swirler [16]

Por otra parte, se tendrá un flujo más o menos recirculado o torbellinado en función del número y grado de apertura de las palas del swirler; del mismo modo, la caída de presión a través de este elemento también repercute en la recirculación. Nace el concepto del número de swirl, mediante el cual se permite caracterizar el grado de recirculación del flujo o fuerza de torbellinado, y que según [17] representa la relación entre las componentes tangencial y axial de la cantidad de movimiento del flujo axial normalizado respecto a un radio característico, según la ecuación (2.2) de carácter adimensional.

$$S = \frac{G_{\phi}}{G_x \cdot r_t} \quad (2.2)$$

En donde las componentes tangencial  $G_\phi$  y axial  $G_x$  quedan definidas por las expresiones (2.3) y (2.4) respectivamente según:

$$G_\phi = \int_{r_t}^{r_h} (Wr) \rho U (2\pi r) dr = (U \tan \theta) 2\pi \rho U \int_{r_t}^{r_h} r^2 dr = \frac{2}{3} \pi \rho U^2 (r_t^3 - r_h^3) \quad (2.3)$$

$$G_x = \int_{r_t}^{r_h} \rho U^2 (2\pi r) dr + \int_{r_t}^{r_h} p (2\pi r) dr \quad (2.4)$$

Donde se tiene que  $r_t$  es el radio exterior del *swirler* y  $r_h$  el radio interior del mismo;  $W$  y  $U$  son las velocidades tangencial y axial a una distancia radial  $r$ , y el ángulo  $\theta$  corresponde con el ángulo de apertura de las palas respecto de la dirección axial. En función del tipo de *swirler* que se tenga en el sistema y la disposición geométrica de los álabes sobre este, se tendrán distintos ángulos  $\theta$  de apertura de las palas. Los *swirlers* de palas fijas o rectas se caracterizan por tener el mismo valor de  $\theta$  a la entrada que a la salida; sin embargo, para *swirlers* con cierta torsión en los álabes se tiene que el ángulo de entrada es nulo.

Finalmente se tiene que  $p$  es la presión estática, variable difícil de cuantificar y que se encuentra contenida en el término de  $G_x$ , por lo que se pretende sustituir dicho término por su expresión simplificada (2.5).

$$G_x' = \int_{r_t}^{r_h} \rho U^2 (2\pi r) dr = \pi \rho U^2 (r_t^2 - r_h^2) \quad (2.5)$$

De modo que sustituyendo en la expresión (2.2) se llega a:

$$S = \frac{G_\phi}{G_x' \cdot r t} \quad (2.6)$$

$$S = \frac{2}{3} \tan \theta \left[ \frac{1 - \left(\frac{r_h}{r_t}\right)^3}{1 - \left(\frac{r_h}{r_t}\right)^2} \right] \quad (2.7)$$

Entre la variedad de *swirlers* que existen, las configuraciones más habituales son la axial y radial, representadas en la Figura 7. De manera general, suelen emplearse *swirlers* de tipo axial en quemadores de combustible líquido, y destacan por presentar un proceso de fabricación sencillo y económico.

Sin embargo, los *swirlers* radiales se caracterizan por ofrecer una mejor aerodinámica al paso del flujo y menor caída de presión; destacan principalmente por utilizarse en sistemas de combustión de bajas emisiones DLE (*Dry Low Emissions*) [14].

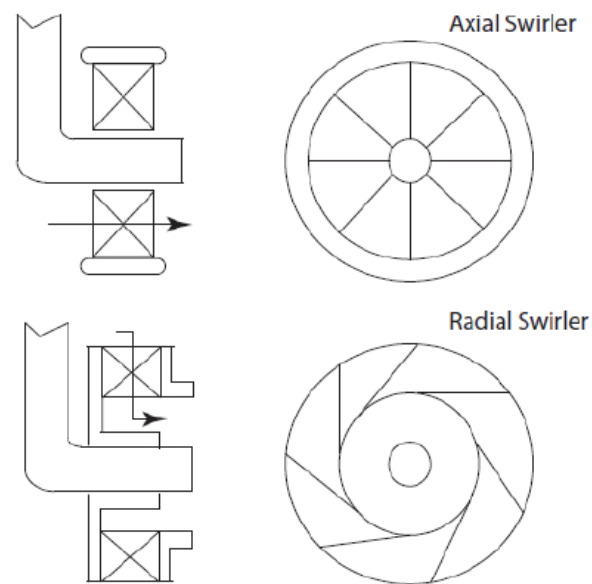


Figura 7. Configuraciones axial y radial para el swirler [18]

La zona de recirculación que se produce a la salida del swirler es la que marca el punto de inflexión en cuanto a reducción de emisiones contaminantes. En los *swirlers* radiales, al tener mayor velocidad del flujo a la salida, se tiene una intensidad de recirculación superior a la que se generaría con *swirlers* axiales, y, por tanto, se tiene una reducción de emisiones mayor.

Sin embargo, en estudios realizados en [19], se observa que, a diferencia del swirler axial, en donde se observa una recirculación controlada y localizada, en el swirler radial se tiene una mayor dispersión de torbellinos, pudiendo el combustible colisionar con las paredes del quemador.

### 2.2.3 Inyector

Las excelentes propiedades energéticas que presentan actualmente los combustibles líquidos hacen que estos sean los más competentes para emplearlos en la combustión de motores turbina de gas aeroderivados; entre ellos, el más empleado en el mercado es el queroseno, caracterizado por



presentar un elevado poder calorífico de combustión y un índice de cetano alto, lo que le permite una ignición rápida y estable [20].

El combustible bien puede inyectarse de forma directa en la zona de flujo recirculado de la cámara, dando lugar a una combustión por difusión; o bien puede ser inyectado junto con el aire antes de entrar a la cámara, dando lugar a una premezcla.

El inyector tiene como premisa introducir el combustible de forma continua e ininterrumpida dentro del quemador, asegurar su buen mezclado con el aire y favorecer el proceso de evaporación para una ignición adecuada. Por tanto, se van a tener dos fases claramente diferenciadas dentro de la cámara de combustión: la fase gas y la fase líquida.

Entre las características más relevantes del quemador turbina de gas destaca la inyección del combustible en forma de gotas nanométricas mediante su atomización, de modo que la superficie de contacto de estas con el aire aumenta considerablemente, consiguiéndose así una excelente mezcla entre ambas fases. La atomización del combustible aumenta su tasa de evaporación y, con ello, la transferencia de masa y energía con la fase gas, de modo que la energía de activación necesaria para la ignición se reduce, consiguiendo así un encendido rápido y eficiente [3]. Será necesario crear una zona altamente turbulenta a la salida del *swirler*, con el fin de acelerar los procesos de mezcla entre las fases.

Existen diferentes tipologías de inyectores que permiten atomizar de diferentes maneras el combustible líquido, a continuación, se muestran las tecnologías de inyección más empleadas en este tipo de quemadores.

- **Pressure Swirl Atomiser** (Figura 8). Este sistema aprovecha la presión que tiene el combustible líquido, respecto de la presión a la que trabaja la cámara, para forzarlo haciéndolo pasar por un orificio, produciendo su fragmentación. Como ventaja se tiene que el tamaño de la nube de gotas atomizadas no depende del grado de carga del motor; sin embargo, aunque funcione bien con dosados pobres, es propenso a generar hollín a presiones elevadas; además de presentar posibles obstrucciones en el orificio de inyección, necesitando en múltiples ocasiones subsistemas de apoyo para elevar la presión, haciéndolo un motor más pesado.

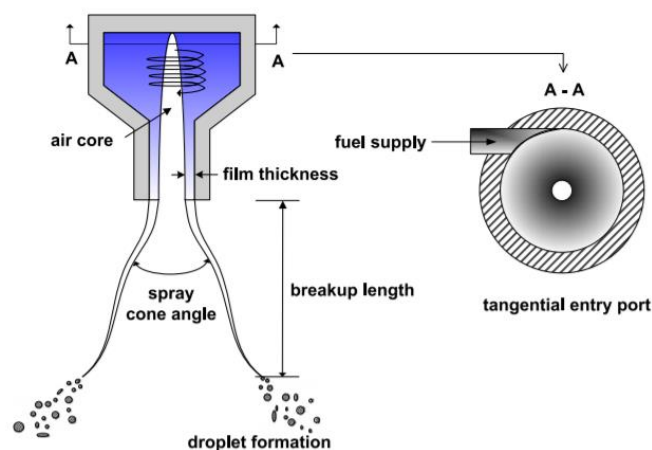


Figura 8. Esquema del sistema de inyección Pressure Swirl Atomiser [21]

- Vaporizers.** Se trata de un sistema que aprovecha el flujo térmico de calor que irradia la llama para precalentar el combustible hasta su evaporación, de forma que este se inyecta directamente pulverizado y en estado gaseoso. Sin embargo, se trata de un sistema con una vida útil muy reducida.
- Air-blast Atomiser.** Se trata de un inyector que permite una mejor atomización y mezcla que el inyector tipo *pressure swirl*. En primer lugar, el combustible líquido experimenta la atomización primaria rompiéndose en ligamentos al encontrar un aire primario torbellinado. A la salida se tiene un aire secundario torbellinado con fuerte efecto cortante, de modo que se tiene la atomización secundaria que termina de generar la nube de gotas deseada. Con este sistema de inyección se evita la creación de hollín y se consigue mantener en niveles aceptables la temperatura de las paredes de la cámara, protegiéndolas por sobrecalentamiento. Sin embargo, durante el arranque se tiene una atomización muy irregular, debido a que los flujos de aire durante este proceso son relativamente lentos. Se trata de uno de los inyectores más utilizados en la industria debido a las excelentes prestaciones que presenta.

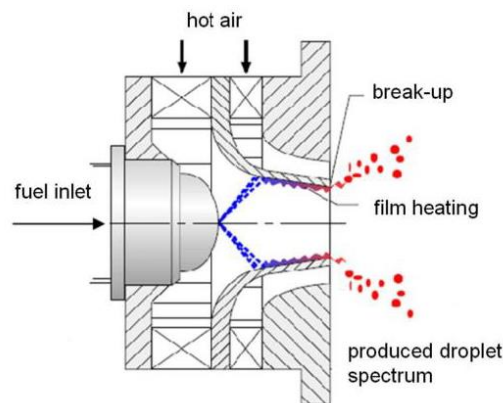


Figura 9. Esquema del inyector Air-blast Atomiser [22]

## 2.3 PRODUCTOS DE LA COMBUSTIÓN

Como ocurre en cualquier reacción química, durante los procesos de combustión que tienen lugar en los quemadores turbina de gas se obtienen una serie de productos entre los que destacan principalmente el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y vapor de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), aparte de encontrar también exceso de aire y partículas, monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ), óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ) por elevadas temperaturas, hidrocarburos sin quemar (UHC) y hollín.

Tanto el  $\text{CO}_2$  como el vapor de agua, están considerados como productos inevitables, ya que son naturales y propios de cualquier proceso de combustión, por lo que no se consideran contaminantes directos; sin embargo, el  $\text{CO}_2$  contribuye en la formación de gases de efecto invernadero y solo puede reducirse si disminuye la cantidad de combustible quemado.

Como se observa en la Figura 2, el CO se caracteriza por disminuir la capacidad de transporte de oxígeno en sangre, siendo muy peligroso por ser inoloro y asfixiante. Por otra parte, el combustible sin quemar UHC, en presencia de la radiación solar, junto con los NO<sub>x</sub> y ciertos compuestos orgánicos volátiles, favorece la generación del *smog fotoquímico* [23] y contribuye negativamente sobre la salud de las personas.

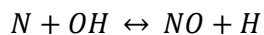
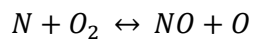
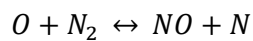
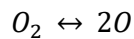
Exposiciones de tiempo reducidas a ciertos NO<sub>x</sub>, como es el caso del NO<sub>2</sub>, pueden provocar irritaciones sobre el sistema respiratorio y visual, pudiendo promover el desarrollo de enfermedades respiratorias y cerebrovasculares de carácter crónico. En este subcapítulo se van a detallar los mecanismos existentes de reducción de emisiones NO<sub>x</sub>.

### 2.3.1 Mecanismos de formación de NO<sub>x</sub>

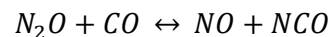
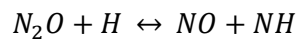
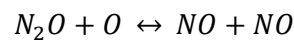
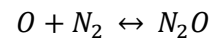
#### Thermal NO<sub>x</sub>

El mecanismo térmico, llamado también *de Zeldovich*, requiere de temperaturas superiores a 1800 K y oxígeno en exceso para ser eficaz. La velocidad con la que se forman los NO<sub>x</sub> también es función de la presión y el tiempo de residencia. Disminuir cualquiera de estos factores reduce la formación de NO<sub>x</sub>, pero la dependencia exponencial con la temperatura hace que la reducción de esta variable sea la estrategia clave a seguir para conseguir una combustión baja en NO<sub>x</sub> [24].

#### Óxido nítrico

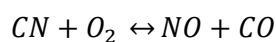
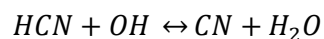
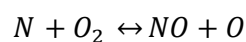
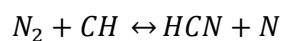


#### Óxido nitroso



#### Prompt NO<sub>x</sub>

Se conoce como mecanismo súbito y tiene lugar en zonas de dosado ricas e interiores de la llama por presencia de radicales HCN [25].



### Fuel NO<sub>x</sub>

Los NO<sub>x</sub> de combustible se forman por la reacción del nitrógeno contenido en el combustible con el oxígeno del aire en la combustión. Suelen darse con mayor frecuencia en combustibles líquidos y sólidos.

## 2.4 QUEMADORES TURBINA DE GAS CON BAJAS EMISIONES

Tal y como se ha visto en el subcapítulo anterior, la formación de NO<sub>x</sub> térmicos tiene dependencia directa y exponencial con la temperatura. Además, resulta que las máximas temperaturas adiabáticas de llama se alcanzan para dosados relativos ligeramente ricos, según se observa en la Figura 10 [26].

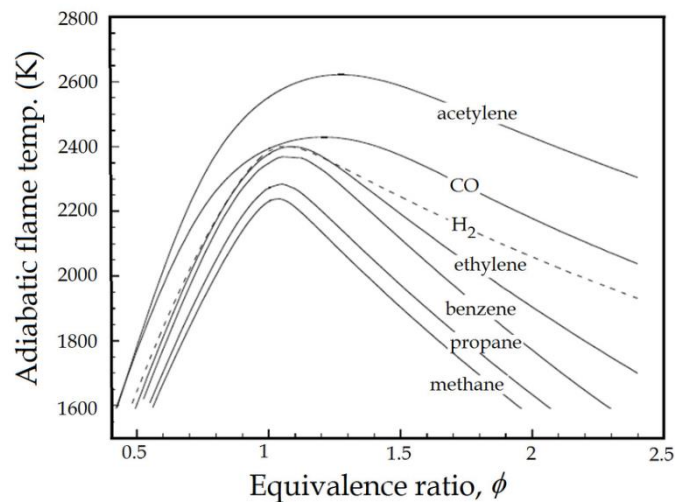


Figura 10. Dependencia de la temperatura adiabática de llama con el dosado relativo [26]

Por tanto, la formación de NO<sub>x</sub> puede controlarse si se tienen regímenes de operación con dosados para los que las temperaturas de llama no sean tan elevadas; de modo que se intentará operar con mezclas estratificadas, trabajando en ciertas zonas de la cámara con dosados ricos ( $\phi > 1.2$ ) y en otras con dosados pobres ( $\phi < 0.8$ ), ya que, como se ha visto, las máximas temperaturas se alcanzan con dosados cercanos al estequiométrico ( $\phi = 1$ ).

Existen diferentes tecnologías de quemadores turbina de gas con distintos esquemas de funcionamiento como son el RQL

### 2.4.1 Rich Burn/Quick-Quench/Lean-Burn (RQL)

Entre las estrategias de combustión, empleadas en quemadores turbina de gas para reducir las emisiones NO<sub>x</sub>, destaca el esquema *Rich Burn/Quick-Quench/Lean-Burn* (RQL), siendo hoy por hoy de los más efectivos y utilizados en motores de aviación.

Esta tecnología, reflejada en la Figura 11, tiene por misión generar una zona primaria de dosado rico (*Rich Burn*:  $1.2 < \phi < 1.8$ ) con exceso de combustible y baja población de especies intermedias que contienen oxígeno, de manera que se alcanzan temperaturas moderadamente bajas (1400 K), logrando una combustión estable por la presencia de especies radicales de hidrocarburos; consiguiendo así reducir notablemente la formación de NO<sub>x</sub>, tanto *thermal* como *15prompt* [27].

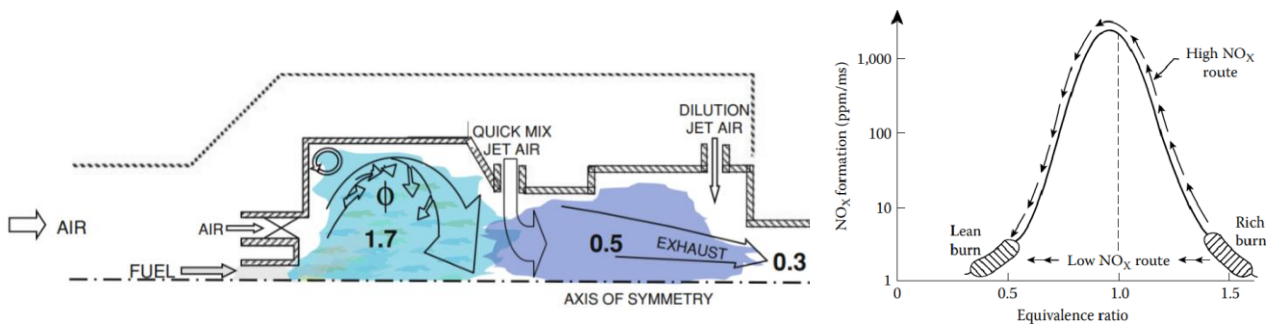


Figura 11. Rich Burn/Quick-Quench/Lean-Burn (RQL) [27]

Seguidamente, se tiene una segunda etapa de aire secundario que consigue enfriar la mezcla hasta tenerla con dosado pobre y exceso de oxígeno. Este enfriamiento debe realizarse rápidamente (Quick-Quench) para minimizar las zonas con combustiones cercanas a la estequiométrica, ya que es donde se tiene la mayor formación de NO<sub>x</sub>. Por último, en esta zona pobre se terminan de oxidar las especies radicales de hidrocarburos no quemadas en la zona primaria, a la vez que con un flujo de aire terciario se controla que la temperatura no exceda de los 1800 K.

Por el contrario, se trata de un esquema que requiere de un motor robusto, con dimensiones y peso que no se ajustan del todo a los requisitos aerodinámicos. Además, al evitar las altas temperaturas que forman NO<sub>x</sub>, se tiene un peor rendimiento del ciclo termodinámico, lo que dificulta encontrar un compromiso entre reducción de emisiones y eficiencia del ciclo [27].

Otro inconveniente que deriva de esta tecnología es la elevada formación de hollín, UHC y CO en la zona primaria como consecuencia del exceso de combustible, por lo que será necesario operar con una temperatura lo suficientemente alta para paliar la formación de estos contaminantes.

#### 2.4.2 Lean Premixed Combustion (LPM)

El esquema *Lean Premixed Combustion* (LPM) se caracteriza por tener una premezcla previa a la cámara de combustión de un combustible gaseoso con aire. Se trata de una configuración muy empleada en quemadores turbina de gas cuyo objetivo consiste en reducir las emisiones NO<sub>x</sub> mediante una combustión pobre operando en condiciones lo más estables y cercanas posibles al apagado de llama.

Sin embargo, el uso de combustibles gaseosos no resulta del todo óptimo en los motores de aviación, de modo que surge el esquema *Lean Premixed Prevaporized* (LPP) en el que la premezcla está formada por aire y combustible líquido evaporado. La configuración LPP tiene como aplicación su uso en quemadores industriales, debido a la presencia de posibles problemas de operación que pueden aparecer en quemadores aeroderivados, como son el retroceso de llama y autoencendido [28].

### 2.4.3 Lean Direct Injection

Debido a los problemas de operación que presenta el LPP con las altas presiones y temperaturas, surge la tecnología del Lean Direct Injection (LDI), a partir de la cual se pretende buscar una combustión sin premezcla, con la inyección directa del combustible líquido atomizado en la cámara de combustión, dando lugar a una combustión por difusión con dosados pobres en torno a  $\phi \sim 0.65$ , obteniéndose favorablemente temperaturas reducidas que evitan la formación de NOx [29].

La característica más relevante que presenta el LDI es la presencia del swirler que, como se vio en la sección 2.2.2, genera un flujo de aire altamente torbellinado a su salida, creando una zona de recirculación, como se observa en la Figura 12, de modo que se favorece la uniformidad de la mezcla, dando lugar a una llama estabilizada. La efectividad que supone el esquema LDI hace que, a día de hoy, existan múltiples vías de investigación en torno este, como es la elaboración del presente trabajo, que pretende analizar esta tecnología y su combustión mediante el modelado CFD.

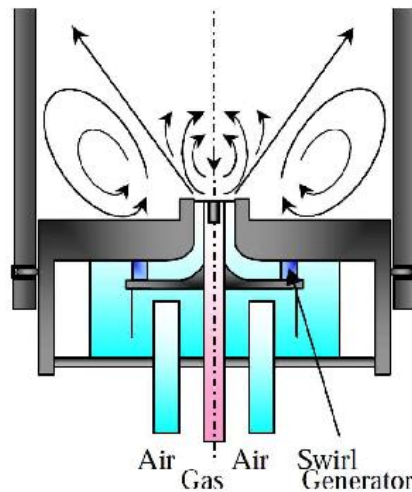


Figura 12. Zonas de recirculación típicas del esquema LDI [30]

# **CAPÍTULO 3: MODELADO MEDIANTE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)**

## **3.1 INTRODUCCIÓN**

En el presente TFM se analizará la combustión que tiene lugar en un quemador de turbina de gas mediante la aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), la cual basa su funcionamiento en herramientas que gobiernan el comportamiento de fluidos mediante la resolución de algoritmos y métodos numéricos. Se trata de una disciplina que se encuentra en pleno desarrollo; sin embargo, es una gran alternativa a los estudios experimentales que en numerosas ocasiones resultan tan costosos, pues mediante el CFD pueden realizarse infinitud de simulaciones sobre el mismo dominio espacial, pudiendo obtener múltiples variables que proporcionen información sobre el caso de estudio.

Se trata de una herramienta fundamental en el desarrollo evolutivo científico y muy empleada en numerosos ámbitos de ingeniería (aerodinámica, hidrodinámica, motores...), entre los que resalta el especial énfasis que están adquiriendo últimamente los fenómenos de combustión y turbulencia, debido a la gran complejidad e incertidumbre que supone el análisis de estos. Además, entre las limitaciones que presenta el CFD destaca su coste computacional, ya que mucho de los problemas a analizar requieren una gran cantidad de tiempo invertido en computar una por una las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía asociadas a cada uno de los nodos que conforman el sistema.

## **3.2 ECUACIONES FUNDAMENTALES**

A continuación, se van a exponer las ecuaciones que deben resolverse de forma iterativa en cada uno de los volúmenes de control en los que se encuentra discretizado el problema. Se trata de las ecuaciones de Navier-Stokes: una ecuación de continuidad, tres ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento y una ecuación de conservación de la energía, todas ellas dependientes del

tiempo. A ellas se les añade las ecuaciones de transporte de especies, y la ecuación de estado que permite acoplar presión, temperatura y densidad [31].

### 3.2.1 Ecuación de continuidad

Se tiene la ecuación de conservación de la masa, en la que el balance de masa entrante y saliente al volumen de control es igual a la masa acumulada en el mismo durante el incremento de tiempo considerado, y que para un flujo compresible adopta la expresión (3.1).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = \overbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t}}^{\text{Término de acumulación}} + \overbrace{\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z}}^{\text{Término convectivo}} = 0 \quad (3.1)$$

En donde  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  es el término de acumulación, que refleja la variación de la densidad con el tiempo y es nulo para problemas con flujo estacionario. El término  $\text{div}(\rho \vec{u})$  es el término convectivo debido al campo de velocidades y hace referencia al flujo neto de entrada y salida en las tres direcciones del volumen de control considerado.

### 3.2.2 Ecuación de conservación de especies

La ecuación de conservación de especies (3.2) tiene por objetivo calcular las fracciones másicas  $Y_i$  de las especies que intervienen en el problema y se caracteriza por incluir las tasas netas de acumulación, de emisión y de producción de una especie cualquiera por unidad de volumen como consecuencia de las reacciones químicas que tienen lugar en el volumen de control. Aparece el concepto de término fuente, que indica la tasa de generación o destrucción de la especie considerada.

$$\overbrace{\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t}}^{\text{Término de acumulación}} + \overbrace{\frac{\partial \rho u Y_i}{\partial x} + \frac{\partial \rho v Y_i}{\partial y} + \frac{\partial \rho w Y_i}{\partial z}}^{\text{Término convectivo}} + \overbrace{\text{div} \vec{J}_i}^{\text{Término difusivo}} = \overbrace{\dot{w}_i}^{\text{Término fuente}} \quad (3.2)$$

Además, también parece un término difusivo debido al campo de concentración, acorde con la Ley de Fick, según la cual las sustancias se difunden desde zonas de altas concentraciones hasta zonas de baja concentración, según la expresión (3.3).

$$\vec{J}_i = -\rho D_i \text{grad}(Y_i) \quad (3.3)$$



### 3.2.3 Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

En este caso se aplica la conservación de la cantidad de movimiento al elemento diferencial de volumen de control mediante la Segunda Ley de Newton, según la cual la tasa de cambio en la cantidad de movimiento de una partícula de fluido es igual al sumatorio de las fuerzas ejercidas sobre esta; entendiendo como fuerzas las de presión, las cortantes por esfuerzos viscosos  $\tau$  y las volumétricas.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{M_x} \quad (3.4)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{M_y} \quad (3.5)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + S_{M_z} \quad (3.6)$$

Puede observarse como la presión viene expresada en magnitud negativa por tratarse de un esfuerzo de compresión. En las tres ecuaciones aparecen términos fuente, que representan las fuerzas másicas debidas a la acción gravitatoria y los términos viscosos. Al considerar un fluido Newtoniano con propiedades físicas idénticas en todas las direcciones (isotropía) se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(\mu \text{grad } u) + S_{M_x} \quad (3.7)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \text{div}(\mu \text{grad } v) + S_{M_y} \quad (3.8)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \text{div}(\mu \text{grad } w) + S_{M_z} \quad (3.9)$$

### 3.2.4 Ecuación de conservación de la energía

La ecuación de conservación de la energía consiste en aplicar el primer principio de la termodinámica sobre el volumen diferencial, de forma que la variación de energía que experimenta la partícula de fluido es igual a la suma entre el calor intercambiado y el trabajo de las fuerzas externas, quedando la ecuación (3.10).

Término de acumulación	Término convectivo	Calor intercambiado	Fuente térmica	Trabajo fuerzas externas
---------------------------	-----------------------	------------------------	-------------------	-----------------------------

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho e)}{\partial t}} + \underbrace{\text{div}(\rho \vec{u} e)} = \underbrace{-\text{div}(\vec{q})} + \underbrace{Q_{FT}} + \underbrace{\dot{W}_{FE}} \quad (3.10)$$

En donde el calor intercambiado  $\vec{q}$  por conducción y difusión de especies viene expresado por la ecuación (3.11).

$$\vec{q} = -k_g \text{grad}(T) - \rho \sum_i D_i \text{grad}(Y_i) \cdot h_i \quad (3.11)$$

El término fuente térmica  $Q_{FT}$  está asociado al proceso de la combustión, mientras que el término de trabajo de las fuerzas externas representa las fuerzas másicas y superficiales (fricción y presión).

### 3.2.5 Ecuaciones de estado

Las ecuaciones de estado permiten relacionar, para un sistema en equilibrio, las variables termodinámicas entre sí, mediante las ecuaciones de los gases ideales (3.12 y 3.13).

$$p = \rho R T \quad (3.12)$$

$$u = C_v T \quad (3.13)$$

Donde  $R$  es la constante universal de los gases,  $u$  la energía interna específica y  $C_v$  la capacidad calorífica a volumen constante. Además, en situaciones con fluidos compresibles en donde se tienen variaciones de densidad por variaciones de presión o temperatura, las ecuaciones de estado permiten crear un nexo de unión entre las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía. Sin embargo, para situaciones con flujos incompresibles sin variación de densidad, hay un desacople entre la ecuación de la energía con las ecuaciones de conservación de masa y momento, de forma que el problema puede ser resuelto sin recurrir al balance de energía [32].

## 3.3 MODELOS DE TURBULENCIA

Dado que nos encontramos ante un problema real, es necesario establecer un modelo que permita caracterizar el comportamiento turbulento del flujo dentro del quemador. El flujo turbulento está comprendido de múltiples torbellinos o *eddies*, caracterizados por presentar numerosas vorticidades y un amplio rango de tamaños o escalas espaciales.

El rango de las escalas espaciales está estrechamente relacionado con el número de Reynolds, el cual indica el grado de turbulencia del flujo, de modo que a mayor número de Reynold se tiene mayor intensidad de turbulencia y un mayor rango de escalas espaciales, lo que dificulta en gran medida la resolución del problema en detalle.

La presencia de fenómenos de turbulencia dentro del quemador favorece la transferencia de masa, momento y energía entre las dos fases: aire y combustible; de modo que los procesos de atomización, evaporación y mezcla mejoran notablemente con la presencia de torbellinos.

Los torbellinos más grandes pertenecen a la *Macroescala Integral* y tienen como dimensión la longitud característica del flujo, impuesta por la geometría del quemador; en ellos se genera la energía cinética turbulenta y predominan los esfuerzos inerciales. Estos remolinos son anisotrópicos, caracterizándose por presentar diferentes variaciones según la dirección. La energía cinética turbulenta es transferida desde los grandes torbellinos hasta los más pequeños a través de los torbellinos intermedios e inerciales de la *Microescala de Tylor*. Finalmente, la energía cinética turbulenta se disipa en forma de calor y debido a los efectos viscosos en la escala espacial asociada a los torbellinos de menor tamaño, conocida como *Microescala de Kolmogorov* [33].

Mediante los modelos de turbulencia es posible asumir hipótesis y modelar nuevas ecuaciones para las diferentes escalas de torbellinos, como se observa en la Figura 13, con el objetivo de poder equilibrar las ecuaciones de transporte y así cerrar y resolver el problema de flujo turbulento.

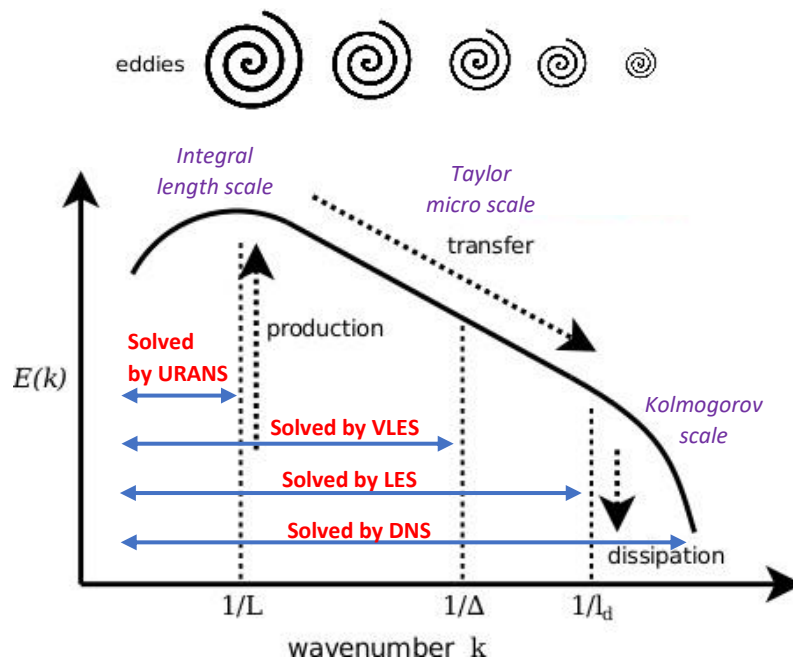


Figura 13. Espectro de energía cinética turbulenta [32]

### 3.3.1 RANS

El modelo de turbulencia RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) resuelve las escalas de mayor tamaño y se basa fundamentalmente en la *Descomposición de Reynolds*, en la que cualquier variable del flujo puede descomponerse en dos términos: una componente media y otra pulsátil (3.14), donde esta última recoge la información sobre las fluctuaciones alrededor de la media temporal.

$$u(t) = \bar{u} + u' \quad (3.14)$$

La *Descomposición de Reynolds* deja un problema no cerrado que requiere de modelos de turbulencia que permitan modelar y añadir ecuaciones adicionales que equilibren el problema. En función del número de ecuaciones adicionales para cerrar el problema, se distinguen distintos tipos de simulaciones RANS según la Tabla 1.

Tabla 1. Ecuaciones adicionales según el modelo de turbulencia RANS

Modelo de turbulencia RANS	Ecuaciones de Transporte adicionales
Mixing length	0
Spalart-Allmaras	1
$k - \varepsilon$	2
$k - \omega$	2
Algebraic stress	2
Reynolds stress (RSM)	7

Esta técnica de modelado de la turbulencia ofrece aproximaciones muy buenas del comportamiento del flujo, aunque en ocasiones la precisión obtenida de los resultados no es suficiente. Además, se trata de las más empleadas actualmente en problemas de ingeniería debido al bajo tiempo computacional que se requiere en los cálculos, en comparación con otros modelos más precisos como el LES (*Large-Eddy Simulation*) que precisan de mayor tiempo.

### Modelo $k - \varepsilon$

Se trata de un modelo semiempírico que permite resolver las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta  $k$  y para su tasa de disipación  $\varepsilon$ , con el objetivo de calcular la energía dinámica turbulenta  $\mu_t$  de la expresión (3.15) y que aparece en las ecuaciones de Navier-Stock adaptadas al caso RANS (3.16) y (3.17).

$$\mu_t = \rho \cdot C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k \vec{U}) = \text{div} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla(k) \right) + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho\varepsilon\vec{U}) = \text{div}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\nabla(\varepsilon)\right) + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.17)$$

Por otra parte, pueden adoptarse simplificaciones aproximadas tanto para  $k$  como para  $\varepsilon$ , a partir de la intensidad de turbulencia  $I$  y la longitud característica  $L$ , según las siguientes expresiones.

$$k = \frac{2}{3}(U_{ref}I)^2 ; \quad \varepsilon = C_\mu^{\frac{3}{4}}\frac{k^{\frac{3}{2}}}{l} ; \quad l = 0.07L \quad (3.18)$$

En algunas simulaciones es posible que se produzcan valores negativos para la energía cinética turbulenta, lo que supone un hecho físicamente imposible. Se utiliza como alternativa, para solventar este problema, el submodelo de turbulencia *realizable*  $k - \varepsilon$ , el cual ofrece valores positivos para la constante  $k$ . Una ventaja inmediata que supone el modelo *realizable*  $k - \varepsilon$  es que trabaja muy bien para flujos rotacionales y presenta una mejor habilidad para modelar el flujo en situaciones con geometrías complejas [34].

### 3.3.2 URANS

El modelo de turbulencia URANS (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) consiste en una versión más sofisticada que el RANS, pues incluye las mismas ecuaciones, pero incorpora un término no estacionario novedoso, de forma que pueden ser resueltos los problemas tridimensionales no estacionarios.

El modelo URANS funciona adecuadamente para problemas de flujos aerodinámicos con vehículos y en situaciones con patrones de torbellinos de Von Kármán, donde se dan remolinos producidos por la ruptura no estacionaria de la capa de fluido al interactuar con cuerpos sumergidos [35].

### 3.3.3 LES

El modelo de turbulencia LES (Large Eddy Simulation) consiste en el filtrado de las ecuaciones de Navier-Stokes de forma que se resuelven computándose directamente los torbellinos de las grandes escalas, mientras que los torbellinos más pequeños son únicamente modelados.

El objetivo del modelo LES es reducir el costo computacional respecto a la simulación numérica directa DNS, de manera que pretende ignorar los torbellinos de las escalas pequeñas, ya que son las más costosas para resolver computacionalmente.

El filtrado especial de las ecuaciones de Navier-Stokes se consigue mediante la inserción de la función de filtro  $G(\vec{x}, \vec{x}', \Delta)$  (3.19), en donde  $\Delta$  es la longitud de corte.

$$\bar{\phi}(\vec{x}, t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} G(\vec{x}, \vec{x}', \Delta) \bar{\phi}(\vec{x}', t) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (3.19)$$

Por otra parte, como valores de corte es conveniente utilizar una longitud aproximadamente igual a la dimensión de la malla empleada, como se muestra en (3.20), ya que no resulta práctico usar longitudes menores.

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (3.20)$$

Hay múltiples investigaciones que analizan las tipologías de funciones de filtro, pero la más utilizada en volúmenes finitos para modelos de turbulencia LES es el *box filter*, expresado en (3.21).

$$G(\vec{x}, \vec{x}', \Delta) = \begin{cases} 1/\Delta^3, & |\vec{x} - \vec{x}'| \leq \Delta/2 \\ 0, & |\vec{x} - \vec{x}'| \geq \Delta/2 \end{cases} \quad (3.21)$$

Por consiguiente, se obtienen las ecuaciones de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento para el modelo de turbulencia LES.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} + \text{div}(\rho \bar{u} \vec{u}) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \mu \text{div}(\nabla(\bar{u})) - (\text{div}(\rho \overline{u \vec{u}}) - \text{div}(\rho \bar{u} \vec{u})) \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} + \text{div}(\rho \bar{v} \vec{u}) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \mu \text{div}(\nabla(\bar{v})) - (\text{div}(\rho \overline{v \vec{u}}) - \text{div}(\rho \bar{v} \vec{u})) \quad (3.24)$$

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho \bar{w})}{\partial t}}_{\alpha} + \underbrace{\text{div}(\rho \bar{w} \vec{u})}_{\beta} = \underbrace{\frac{\partial \bar{p}}{\partial z}}_{\gamma} + \underbrace{\mu \text{div}(\nabla(\bar{w}))}_{\delta} - \underbrace{(\text{div}(\rho \overline{w \vec{u}}) - \text{div}(\rho \bar{w} \vec{u}))}_{\varphi} \quad (3.25)$$

En donde:

- $\alpha$  es la variación temporal de las componentes filtradas de la cantidad de movimiento.
- $\beta$  son los términos convectivos.
- $\gamma$  son los elementos del campo de presiones.
- $\delta$  son los términos difusivos.
- $\varphi$  son residuos como consecuencia del filtrado.

El último término residual está directamente relacionado con el concepto *Sub-Grid Scale* (SGS), asociado a los esfuerzos que son consecuencia del transporte convectivo y las interacciones con torbellinos de pequeña escala, menores que las dimensiones de la malla. Estos esfuerzos se ven condicionados por varias contribuciones, que pueden ser calculadas al descomponer las variables del flujo en su componente filtrada y las fluctuaciones de pequeñas escalas espaciales según (3.26).

$$\phi(\vec{x}, t) = \bar{\phi}(\vec{x}, t) + \phi'(\vec{x}, t) \quad (3.26)$$

Al aplicar la condición (3.26) se tiene que los esfuerzos SGS quedan determinados por la ecuación (3.27).

$$\tau_{ij} = \underbrace{\rho \overline{u_i u_j}}_{(a)} - \rho \overline{u_i} \overline{u_j} + \underbrace{\rho \overline{u_i u_j'}}_{(b)} + \underbrace{\rho \overline{u_i' u_j'}}_{(c)} \quad (3.27)$$

En donde el término (a) corresponde con los esfuerzos de Leonard, asociados a los efectos sobre la escala que se esté considerando en la resolución del problema. El término (b) hace referencia a los esfuerzos cruzados  $C_{ij}$  donde queda representada la interacción de los torbellinos SGS al tener influencia con el flujo del problema. Por último, el término (c) caracteriza los esfuerzos de Reynolds LES, debidos a la cesión de cantidad de movimiento por la influencia de las interacciones de los torbellinos SGS, los cuales son modelados en [36].

### **Smagorinsky-Lilly Model**

El modelo de Smagorinsky es una variante del modelo LES en la que en su resolución no tiene en cuenta la ecuación de transporte que relaciona la viscosidad turbulenta con el tensor de deformación. El modelo considera que la tasa de deformación es proporcional a los esfuerzos de Reynolds LES  $R_{ij}$  según se representa en (3.28).

$$R_{ij} = -2 \mu_{SGS} \bar{S}_{ij} + \frac{1}{3} R_{ij} \delta_{ij} = -\mu_{SGS} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{3} R_{ii} \delta_{ij} \quad (3.28)$$

En donde la viscosidad dinámica SGS viene representada por (3.29), y el término  $\frac{1}{3}R_{ij}\delta_{ij}$  garantiza que la energía cinética turbulenta de los torbellinos equivale al sumatorio de los esfuerzos SGS que han sido modelados.

$$\mu_{SGS} = \rho(C_{SGS}\Delta)^2|\bar{S}| \quad (3.29)$$

Donde  $|\bar{S}|$  representa la tasa de deformación en promedio y que se expresa según (3.30).

$$|\bar{S}| = \bar{S}_{ij}\sqrt{2} \quad (3.30)$$

Una de las discrepancias que presenta este modelo respecto del *Smagorinsky Dinámico* es que, para este modelo, el parámetro  $C_{SGS}$  deja de ser independiente del tiempo y el espacio, y adquiere naturaleza variable.

Por último, al igual que ocurre con los cálculos con modelados RANS, en LES deben inicializarse y establecerse ciertas condiciones de contorno. Estas condiciones no afectan a la solución final del problema, ya que solo influyen sobre la capacidad de convergencia y el tiempo invertido en terminar la simulación.

Mediante la Ley de la Pared de Theodore von Kármán se permite conocer cómo debe ser el refinamiento de la malla en las inmediaciones a una pared. Se emplea para ello la variable adimensional  $y^+$  y que, acorde con la expresión (3.31), es función de la distancia hasta la pared  $y$ , y es lineal con el cociente entre la velocidad cortante  $u_\tau$  y la viscosidad cinemática  $\nu$ .

$$y^+ = y \frac{u_\tau}{\nu} \quad (3.31)$$

Según el valor de  $y^+$  obtenido, se pueden distinguir tres capas diferenciadas en la zona cercana a la pared, mostradas en la Figura 14, donde las líneas de resultados experimentales de color rojo deben ajustarse en la medida de lo posible a las líneas teóricas de color azul.



Para valores de  $y^+ < 5$  se tiene la subcapa viscosa, en la que puede asumirse que las tensiones turbulentas son despreciables frente a las viscosas y en la que la velocidad del fluido crece de forma lineal con la distancia a la pared [37].

Seguidamente se encuentra la capa de transición o *buffer* ( $5 < y^+ < 30$ ) en la que los esfuerzos turbulentos y viscosos adquieren prácticamente el mismo peso relativo. Por último, se encuentra la capa logarítmica ( $y^+ > 30$ ) en la que Prandtl introdujo el concepto de longitud de mezcla; se trata de una capa en la que las tensiones de corte viscosas son prácticamente despreciables frente a las turbulentas.

Por otra parte, debe establecerse como restricción un refinamiento  $y^+$  inferior a la unidad para el mallado de la geometría del dominio, por lo que suele aplicarse la propiedad de no deslizamiento en las inmediaciones de la pared, así se consiguen integrar las ecuaciones de conservación de Navier-Stokes con el filtrado incorporado.

Aunque las condiciones de contorno a la salida no son apenas problemáticas, es conveniente resaltar que las condiciones de contorno establecidas a la entrada del dominio condicionan directamente el resultado de la solución final. La forma más óptima de trabajar es emplear un modelo de turbulencia con el que previamente se ha operado y con el que se han establecido distribuciones de velocidad media; así de este modo, lo único que es necesario añadir son las perturbaciones con las correspondientes intensidades de turbulencia. Se trata de un proceso lento, pues deben estabilizarse las propiedades turbulentas previamente a que el flujo medio llegue al estado de equilibrio. Como solución, a la entrada se suele emplear un modelo de turbulencia RANS, que permite dar una aproximación sencilla y no requiere tanto tiempo computacional.

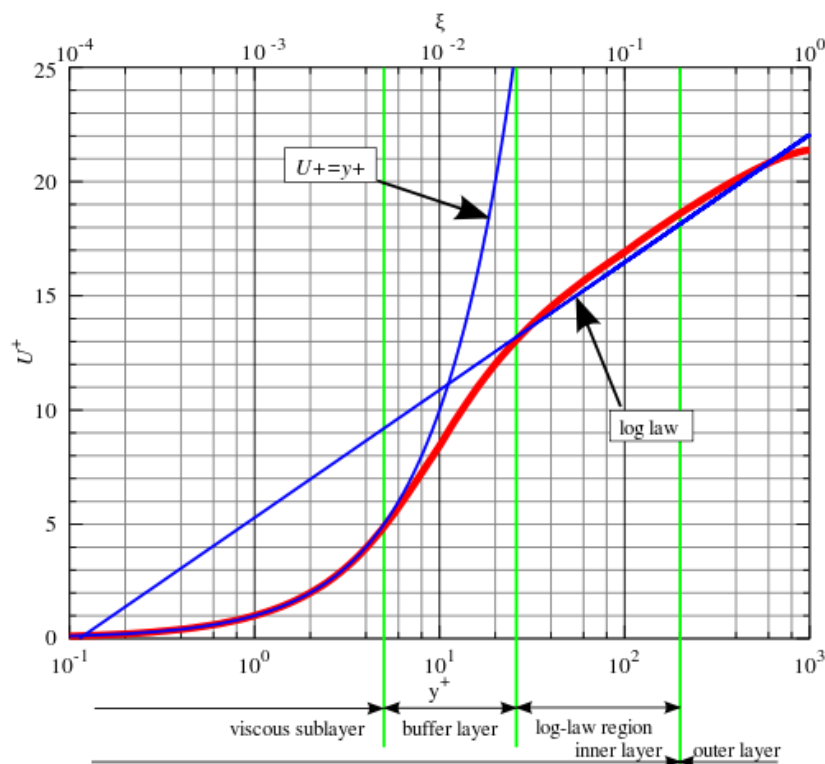


Figura 14. Capas de la Ley de la Pared [37]

Como conclusión, los modelos de turbulencia LES siguen en pleno auge de investigación por resultar bastante óptimos y ofrecen una gran precisión para problemas de geometrías complejas, sin embargo, como se ha visto, requieren de gran coste computacional por el hecho de resolver las ecuaciones de transporte del flujo no estacionario.

### 3.3.4 DNS

Mediante este método se resuelven numéricamente todas escalas espaciales de la turbulencia, desde la escala integral donde se presentan los torbellinos con mayor energía cinética turbulenta, hasta las microescalas de Kolmogorov en donde se disipa dicha energía por efectos de viscosidad.

Para ello se calculan las ecuaciones de Navier-Stokes sin ninguna simplificación y sin ningún modelo de turbulencia; por lo que deben resolverse con una discretización sumamente fina todas las gamas espaciales y temporales de la turbulencia. Se trata de un proceso que requiere de mucho coste computacional tanto para su cálculo como para su posterior procesado, por lo que apenas tiene hoy en día aplicación en la industria [38].

## 3.4 MÉTODOS DE DISCRETIZACIÓN

Dado que no existe resolución analítica y directa de las ecuaciones de transporte anteriormente descritas, estas deben resolverse mediante la aplicación de métodos numéricos en el cálculo del CFD, de forma que se consiga un resultado aproximado y completamente válido, con un margen de error significativamente pequeño.

Para ello, una primera acción a llevar a cabo se basa en discretizar el problema, cambiando el entorno de cálculo continuo por uno discreto. A continuación, se mencionan los métodos de discretización más empleados en el cálculo del CFD.

### 3.4.1 Método de las diferencias finitas

Un problema con ecuaciones diferenciales puede discretizarse en  $x_i$  posiciones de  $i$  nodos, separados respectivamente un valor  $\Delta x$  equiespaciado. De forma que, en la resolución del problema, las derivadas pueden sustituirse por diferencias finitas según la ecuación (3.32), donde  $u$  hace referencia a la variable dependiente, y  $x$  a la posición adoptada en el tiempo.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = 0 \quad (3.32)$$

No obstante, la resolución mediante este método presenta problemas de acople en situaciones con geometrías complejas, por lo que se recurre a la forma integral que permite una mejor adaptación, según la expresión (3.33); siendo  $w(x)$  la función de prueba.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \rightarrow \int_0^L \frac{\partial u}{\partial t} \cdot w(x) dx + \int_0^L \frac{\partial u}{\partial x} \cdot w(x) dx = 0 \quad (3.33)$$

### 3.4.2 Método de los elementos finitos (MEF)

Se trata de un método muy bueno para discretizar el dominio generando soluciones aproximadas en ecuaciones diferenciales parciales de gran complejidad. Se aproxima la solución obtenida del método de diferencias finitas, quedando del siguiente modo.

$$u(x, t) = \sum_i U_i(t) \cdot N_i(x) \quad (3.34)$$

En donde se tiene que las funciones  $N_i(x)$  (distintas de cero para determinadas zonas del dominio) contienen el desarrollo en serie de  $u$ , de modo que al aplicar  $w(x) = N_i(x)$ , se consiguen funciones de base continuas como polinomios que permiten obtener la resolución aproximada por este MEF.

### 3.4.3 Método de volúmenes finitos (FVM)

Se trata del método de discretización más atrayente por los científicos e ingenieros que trabajan en la resolución de problemas mediante CFD; a diferencia del método MEF, el método de volúmenes finitos funciona de manera acertada para flujos reactivos y turbulentos con CFD, por lo que va a ser empleado en el presente TFM.

Este método permite descomponer el dominio en volúmenes de control (Figura 15), donde se establecen las ecuaciones de conservación para cada uno de ellos y, además, se tiene que las variables se encuentran almacenadas en los nodos.

Una vez definidos los volúmenes de control, se aplica el Teorema de la Divergencia de Gauss, de modo que se permite pasar de integrales de volumen a integrales de superficie, por lo que la ecuación de transporte de continuidad toma la forma de la expresión (3.35), en la que  $V_i$  son los volúmenes finitos asociados a cada volumen de control  $i$ ,  $\bar{\rho}_i$  es la densidad media que se tiene en la celda  $i$ , y  $A$  es la superficie [39].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) \rightarrow \frac{d\bar{\rho}_i}{dt} \cdot V_i = - \int_{V_i} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) dV = - \int_{A_i} (\rho \vec{u}) \cdot \vec{n} dA \quad (3.35)$$

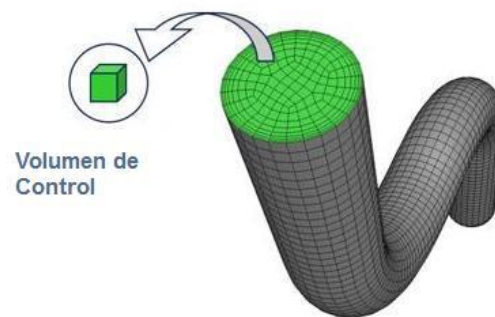


Figura 15. Volúmenes de control [40]

## CAPÍTULO 4: SETUP COMPUTACIONAL

### 4.1 PREPROCESADO

#### 4.1.1 Geometría del quemador KIAI

El primer paso a realizar es definir la etapa de preprocesado, donde se va a configurar el setup de estudio. Como se indicó al comienzo de la memoria, en el modelado CFD se va a importar la geometría del quemador del proyecto europeo KIAI (*Knowledge for Ignition, Acoustics and Instabilities*) del laboratorio CORIA, perteneciente a la Universidad de Rouen (Francia). Se trata de una maqueta experimental (Figura 16) en la que se llevan a cabo investigaciones académicas en base a sistemas de combustión de bajas emisiones.

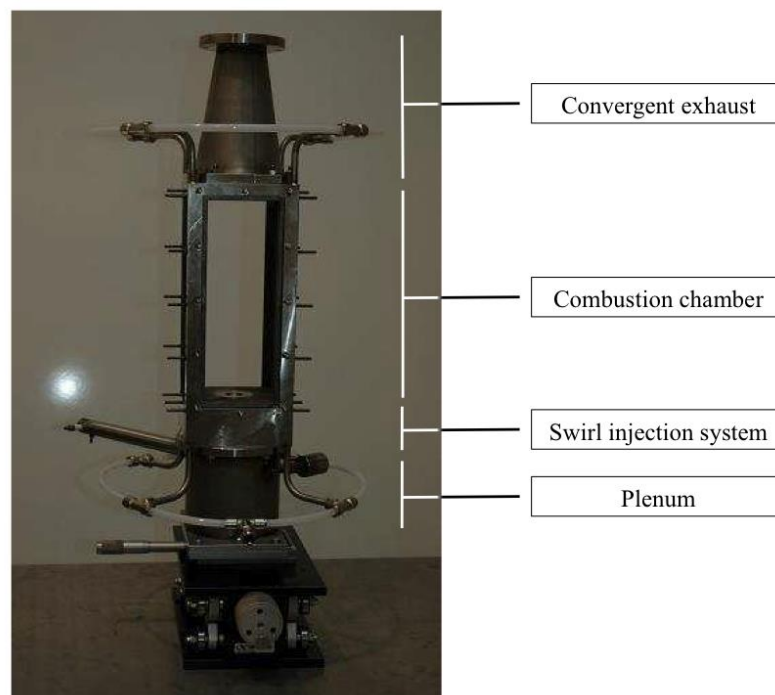


Figura 16. Geometría del quemador KIAI [41]

Como se observa en las Figuras 16 y 17, se distinguen cuatro elementos que caracterizan el conjunto de la maqueta experimental: el plenum, la zona de inyección del aire y combustible, la cámara de combustión y la tobera.

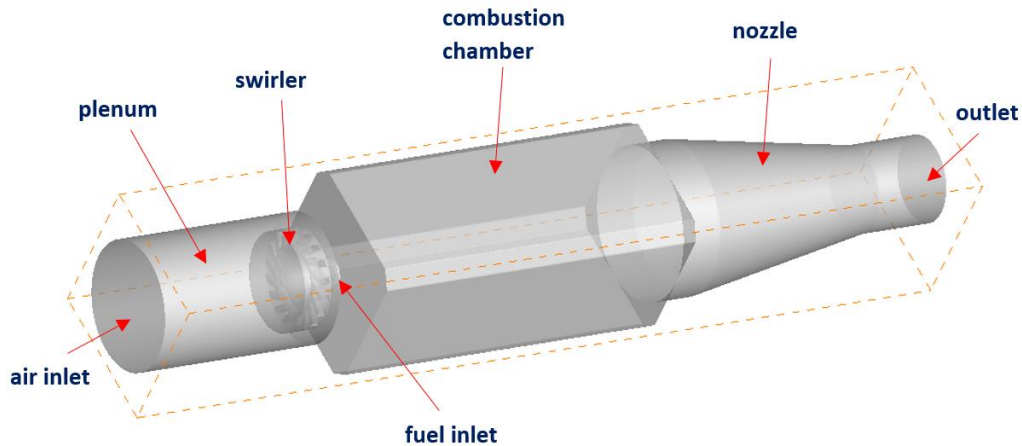


Figura 17. Perspectiva del dominio computacional del quemador CORIA

A continuación, se va a describir la funcionalidad de tales elementos.

- **Plenum:** Tiene como objetivo reducir la velocidad del flujo antes de llegar al sistema de inyección. Para ello se sitúa una rejilla en la parte inferior del plenum, de modo que al pasar el aire por esta se destruyen las grandes estructuras de flujo.
- **Sistema de inyección del aire:** La corriente de aire es inyectada a través de un swirler radial de diámetro exterior  $\phi_{ext} = 20$  mm e interior  $\phi_{int} = 20$  mm. Además, está compuesto por 18 paletas de dimensiones 6 x 8 mm, las cuales se encuentran predispuestas con una inclinación de  $45^\circ$ , como se observa en la Figura 18.



Figura 18. Swirler del quemador KIAI [41]

- **Sistema de inyección del combustible:** El combustible empleado en el caso de estudio va a ser el n-heptano ( $C_7H_{16}$ ), el cual es introducido directamente en la cámara de combustión, sin premezcla previa, mediante un inyector tipo *pressure-swirl*, descrito en la sección 2.2.3, y que favorece la inyección del combustible a gran velocidad, favoreciendo su atomización en gotas y formando un cono hueco de  $80^\circ$ .

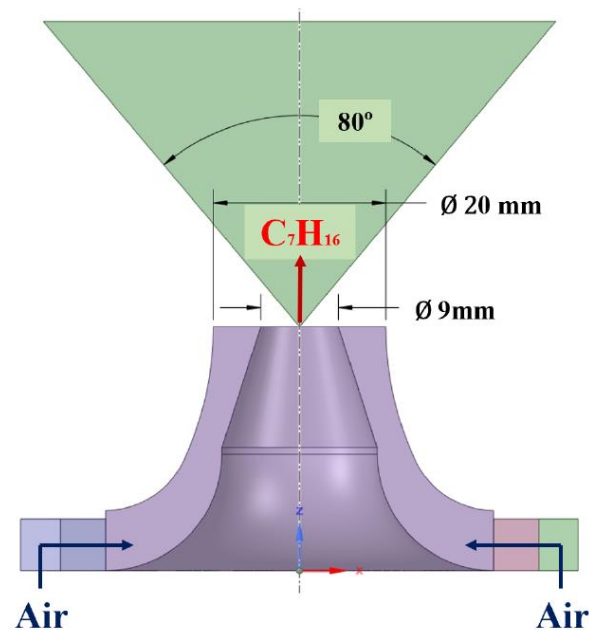


Figura 19. Esquema de inyección del n-heptano en el quemador KIAI [41]

- **Cámara de combustión:** Es de 260 mm de largo y tiene una sección transversal cuadrada de 100 x 100 mm. Se trata de un quemador atmosférico, por lo que la presión dentro de la cámara es de 1 bar. Además, como material exterior se emplea un cuarzo sintético no opaco que permite visualizar los procesos que se llevan a cabo dentro del quemador.
- **Tobera:** Se trata de un conducto convergente por el que salen los gases de escape como productos de la combustión. La tobera tiene por objetivo evitar que entre de nuevo aire parásito en el quemador como consecuencia de la depresión generada por el flujo torbellinado a la salida del swirler [41].

#### 4.1.2 Software de cálculo CFD

El software empleado en la configuración del setup del quemador turbina de gas y mediante el cual se realizan las simulaciones del CFD es CONVERGE; se trata del software líder en Dinámica de Fluidos Computacional. Pese a ser un software comercial, el Instituto CMT de Motores Térmicos de la UPV

dispone de licencias gratuitas debido a la colaboración en proyectos de investigación. Entre las ventajas que presenta, cabe destacar que CONVERGE opera con el método de volúmenes finitos, de modo que permite crear automáticamente la malla y adaptarla dinámicamente al problema con tal de maximizar la precisión y la eficiencia computacional. Además, permite trabajar óptimamente con turbinas de gas en las que aparecen geometrías complejas, pudiendo modelar de forma exitosa fenómenos de turbulencia y los procesos de combustión con modelos físicos avanzados.



Figura 20. Emblema del software comercial CONVERGE

#### 4.1.3 Condiciones iniciales y de contorno

El primer paso a realizar en CONVERGE consiste en establecer las condiciones iniciales y de contorno del problema, las cuales se van a tomar como referencia de los datos experimentales de Marrero-Santiago, recogidos en [43] y [44].

Como se ha visto, la inyección líquida de combustible se va a realizar con n-heptano, el cual se inyecta en una cámara de combustión a presión atmosférica (101325 Pa) mediante un atomizador simplex pressure. El aire de entrada atraviesa el plenum con un flujo másico de  $\dot{m}_{air} = 8.2$  g/s y lo hace a una temperatura inicial de  $T_{air} = 416$  K. En cambio, el n-heptano es inyectado con un caudal másico de  $\dot{m}_{C_7H_{16}} = 0.33$  g/s a una temperatura inicial de  $T_{C_7H_{16}} = 350$  K. El dosado relativo global del sistema con esta configuración es de  $\phi = 0.61$ , cercano al límite de apagado de llama en dosados pobres, con tal de evitar la formación de NOx.

Como condiciones de contorno, se tiene que las paredes de la cámara de combustión se consideran isotermas con una temperatura de  $T_{wall} = 1000$  K y sobre ellas se impone la condición de no deslizamiento, de modo que la velocidad de fluido en contacto con la pared es nula. Por otra parte, la velocidad del combustible a la salida del orificio de inyección es de 41.2 m/s, lo que se corresponde con un número de Reynold de 50000.

#### 4.1.4 Estrategia de mallado de CONVERGE

Como se ha mencionado, tras importar la geometría de KIAI, CONVERGE permite realizar un mallado mediante la triangulación automática de las superficies. Sin embargo, el usuario tiene la capacidad de corregir posibles errores de triangulación con tal de obtener mayor resolución en aquellas zonas problemáticas con geometrías más complejas.



Además, CONVERGE dispone de herramientas que permiten modificar las características del mallado antes y durante la etapa de simulación, con el objetivo de optimizar los instantes de refinamiento y poder así optimizar el coste computacional de los cálculos. A continuación, se muestran las estrategias de mallado llevadas a cabo.

### ***Grid Scaling***

Se trata de una herramienta de mallado que actúa directamente y de forma global sobre todo el dominio, ensanchándolo o refinándolo. Este mecanismo de mallado puede reducir los tiempos computacionales, ya que permite aumentar el grosor del mallado durante los momentos no críticos de la simulación, mientras que, en aquellos de flujo críticos, como puede ser la inyección del combustible, permite refinar la malla para obtener mayor resolución en los detalles del flujo.

### ***Fixed embedding***

Esta herramienta permite refinar la malla en aquellas zonas geométricas de interés del dominio en donde se pretende obtener una mayor resolución de los resultados de las variables del flujo. El refinamiento de cada zona de interés se realiza en base a un factor de incrustación "*embed\_scale*" según la expresión (4.1), de modo que al aumentar este, mayor será el refinamiento de la malla para la zona considerada.

$$embed = \frac{base\_grid}{2^{embed\_scale}} \quad (4.1)$$

Esta herramienta de mallado va a ser aplicada en la zona del swirler, por ser una zona interesante a analizar.

### ***Adaptive Mesh Refinement (AMR)***

Se trata de la herramienta de mallado más característica que ofrece CONVERGE; mediante el AMR se permite refinar la malla automáticamente durante el proceso de simulación. Este algoritmo trabaja óptimamente con flujos reactivos y permite detectar aquellas zonas en la que se producen fluctuaciones en los gradientes de las variables de interés de las celdas, como son la temperatura, velocidad..., y si esas variaciones superan un límite establecido, el AMR se encarga de refinar más aún la malla.

En el setup de estudio se va a emplear una Base Grid de 3 mm, aparte de recurrir al AMR y al Fixed Embedding, como se muestra en la Figura 21.

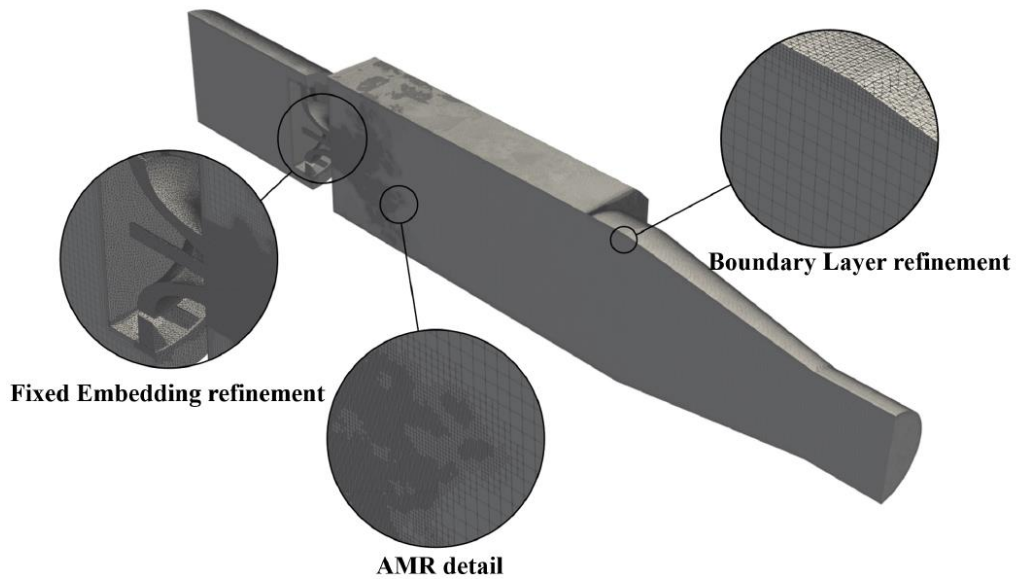


Figura 21. Refinamiento de la geometría KIAI con las herramientas de mallado de CONVERGE [41]

#### 4.1.5 Modelado del spray

En el quemador turbina de gas, cuando el n-heptano atraviesa el inyector a alta presión origina unas perturbaciones en la superficie del líquido que originan la ruptura de la vena líquida en ligamentos, teniendo un primer proceso conocido como atomización primaria. Estas perturbaciones aparecen como consecuencia de la interacción del combustible con el aire, la relajación del perfil de velocidades al abandonar el inyector o los propios fenómenos de turbulencia, entre otros. El objetivo es generar una nube de gotas (Figura 22), con el fin de quemar y evaporar en el menor tiempo posible.

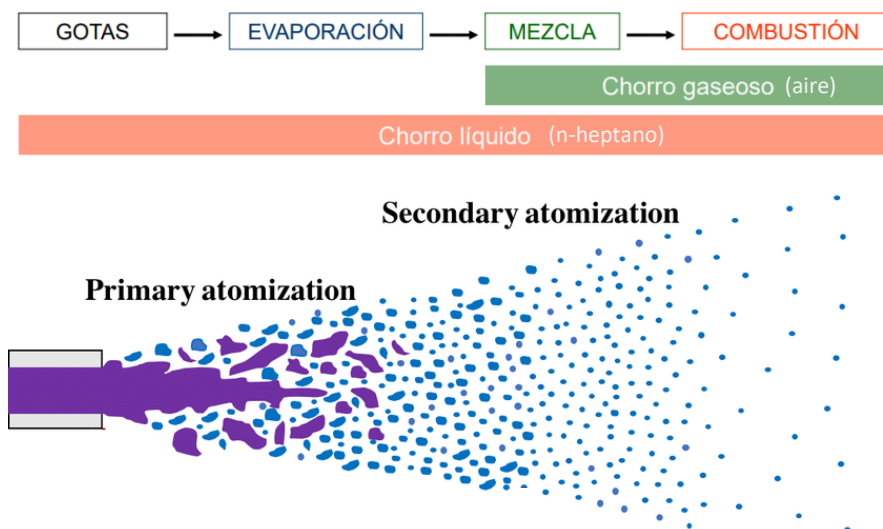


Figura 22. Fenómenos de atomización primaria y secundaria [45]

Posteriormente, a raíz de la interacción de la fase líquida con el aire, las gotas generadas tras la atomización primaria se rompen en otras más pequeñas, al superar las fuerzas aerodinámicas a las fuerzas de tensión superficial. Por último, el combustible se evapora y se mezcla con el aire, para dar paso a la ignición y a los procesos de combustión.

La forma en la que se produzcan los fenómenos de atomización y evaporación condicionan directamente el rendimiento de la combustión, es por ello que es importante seleccionar adecuadamente con qué modelo trabajará CONVERGE.

La atomización primaria es modelada en base a una distribución inicial de tamaños de gotas, mientras que para la atomización secundaria existen múltiples modelos como son el Kelvin-Helmholtz (KH), Rayleigh-Taylor (RT), Linearized Instability Sheet Atomization (LISA) o el Taylor Analogy Breakup (TAB).

En el presente trabajo, la atomización secundaria va a ser modelada siguiendo la estrategia Taylor Analogy Breakup (TAB), según la cual las parcelas de líquido son inyectadas siguiendo una distribución Rosin-Rammler, caracterizada a su vez por el Sauter Mean Diameter  $D_{32} = 3.1 \text{ e-}5 \text{ m}$ ; de forma que a partir de un radio de inyección circular de  $0.00015 \text{ m}$  se genera un cono hueco de  $76^\circ$  de apertura y  $8^\circ$  de espesor.

#### 4.1.6 Modelado de la turbulencia

El modelo de turbulencia que se va a emplear para las simulaciones es el RANS  $k-\epsilon$  RNG, debido al reducido tiempo computacional que requiere para resolver el problema de flujo, en comparación con el modelo LES que, aunque sea más preciso, necesita de mayor tiempo. De esta manera, se procede a configurar dicho modelo en CONVERGE, especificando la constante de von Kármán y el parámetro de la Ley de la Pared, aparte de insertar las constantes asociadas al modelo RANS, como se observa en la siguiente Figura 23.

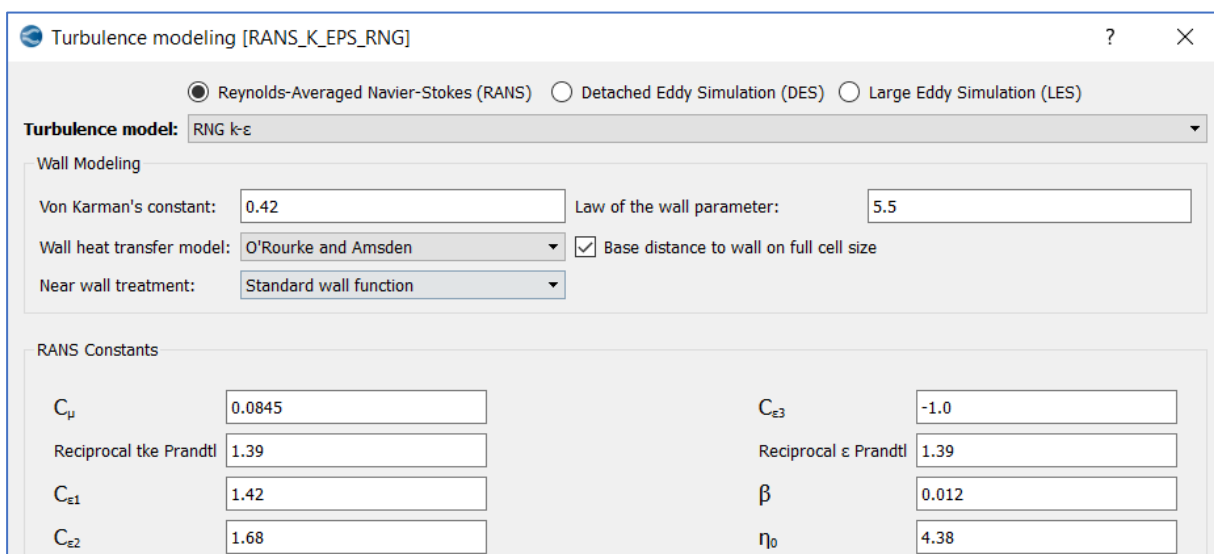


Figura 23. Configuración del modelo de turbulencia RANS para el submodelo  $k-\epsilon$  RNG

## 4.2 MODELADO DE LA COMBUSTIÓN

El modelado de la combustión debe realizarse importando un mecanismo químico específico. Los mecanismos químicos vienen definidos en ficheros, en donde se recoge información sobre las especies químicas que intervienen en las reacciones de combustión y las propiedades termodinámicas asociadas a dichas especies, como son la composición, entalpía y las tasas de reacción química.

En primer lugar se ha partido de un mecanismo químico propio de CONVERGE conocido como *Extended Mechanism*; sin embargo, este dispone de 88 especies, de modo que cada vez que CONVERGE comienza a resolver las reacciones de combustión y de cinética química para cada una de las celdas, el tiempo computacional se hace bastante costoso.

Por consiguiente, se va a hacer uso de un mecanismo cinético-químico reducido con un número de especies menor, con el objetivo de aligerar los tiempos de cálculo reactivos; este mecanismo se detalla en [46] y a su vez se descompone en seis versiones en función del proceso de combustión que se tenga; a este conjunto de mecanismos reducidos se le conoce como Small Skeletal Mechanisms (SSM), tal y como se recoge en la Tabla 2. Se ha llevado a cabo una evaluación de dichos mecanismos en diferentes configuraciones de combustión, con llamas simplificadas de tipo premezclado o de autoencendido.

Tabla 2. *Small Skeletal Mechanisms* y número de especies y reacciones

ID	NAME	SPECIES	REACTIONS
1	<i>HT ignition</i>	37	88
2	<i>HT-LT ignition</i>	48	102
3	<i>LBV</i>	28	57
4	<i>LBV-HT ignition</i>	44	150
5	<i>extinction</i>	44	133
6	<i>Full</i>	65	230

En dicha tabla, *HT ignition* corresponde con “encendido a alta temperatura”; *HT-LT ignition* con “encendido a alta y baja temperatura”; LBV (Laminar Burning Velocity) hace referencia a “velocidad de combustión laminar”  $S_L$ , por la presencia de un frente de llama laminar.

En función del entorno en el que se vaya a trabajar, intervendrán unas reacciones u otras; de modo que si se tiene un problema de autoencendido, con una mezcla de aire y combustible a elevada presión y temperatura, intervendrán determinadas reacciones químicas. Sin embargo, en el caso extremo en el que se tiene una llama premezclada, aun teniendo la mismas especies de combustible y aire, se tendrán unas reacciones químicas diferentes.

Por tanto, se va a tratar de encontrar un mecanismo químico reducido que permita disminuir el tiempo computacional de los cálculos reactivos, en comparación con el mecanismo extendido de CONVERGE.

Para ello, considerando el n-heptano como combustible, se ha realizado un análisis del tiempo de autoencendido y velocidad de combustión laminar entre varios mecanismos reducidos del *Small Skeletal Mechanisms*, junto con el mecanismo detallado o extendido de CONVERGE y el detallado CRECK de Pelucchi que aparece en [46] y [47].

Se ha empleado un *script* de Cantera para obtener el tiempo de ignición de algunos mecanismos, en función de la temperatura y presión iniciales de la mezcla. Se ha realizado un barrido en el reactor de autoencendido para 1, 10 y 50 atm de presión, con temperatura inicial de 750-1200 K con  $dT=50$  K.

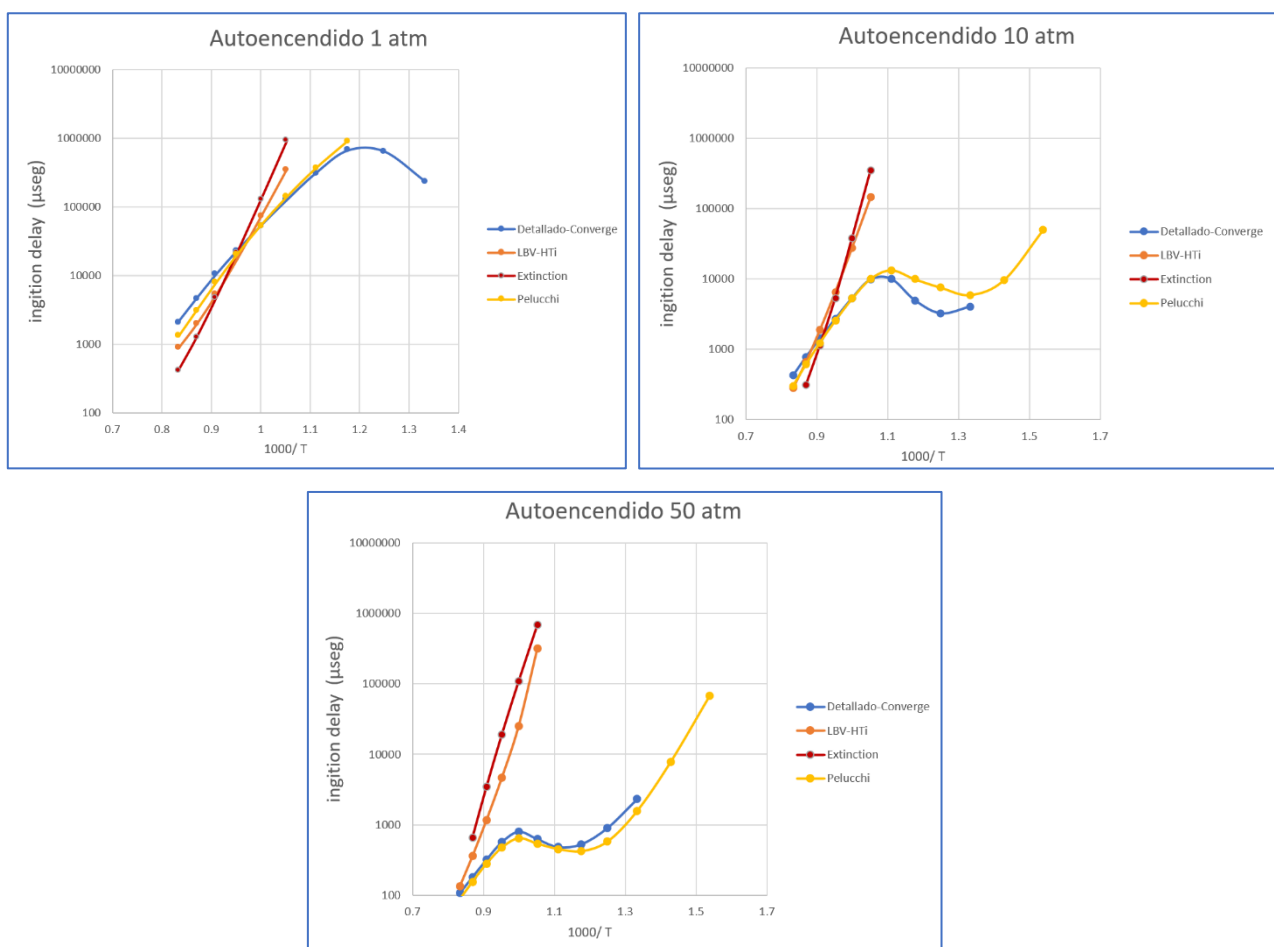


Figura 24. Tiempos de retraso en la ignición para autoencendido en 1, 10 y 50 atm

Para elevadas temperaturas y con 1 y 10 atm, puede verse como el mecanismo detallado de converge es más lento en la ignición, por lo que se decide emplear el mecanismo químico LBV de 28 especies en el setup de estudio, a fin de agilizar la resolución en los cálculos reactivos.

### 4.3 SOLVER

Esta etapa tiene por objetivo emplear algoritmos iterativos para resolver las matrices correspondientes a las ecuaciones de transporte de cada volumen de control del problema. Se dice que la simulación converge cuando el error en la solución entre dos iteraciones consecutivas es inferior a un umbral establecido por el usuario. CONVERGE y, en general, los programas de cálculo CFD, suelen emplear dos algoritmos en la resolución del problema, el SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations), muy empleado en simulaciones estacionarias; y, por otra parte, el algoritmo PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators), utilizado en simulaciones no estacionarias. Para evitar las oscilaciones espurias se emplea el algoritmo Rhie-Chow, detallado en [48].

El algoritmo de cálculo que se va a emplear en la etapa de SOLVER del setup de estudio es el PISO, cuyo esquema iterativo se detalla a continuación.

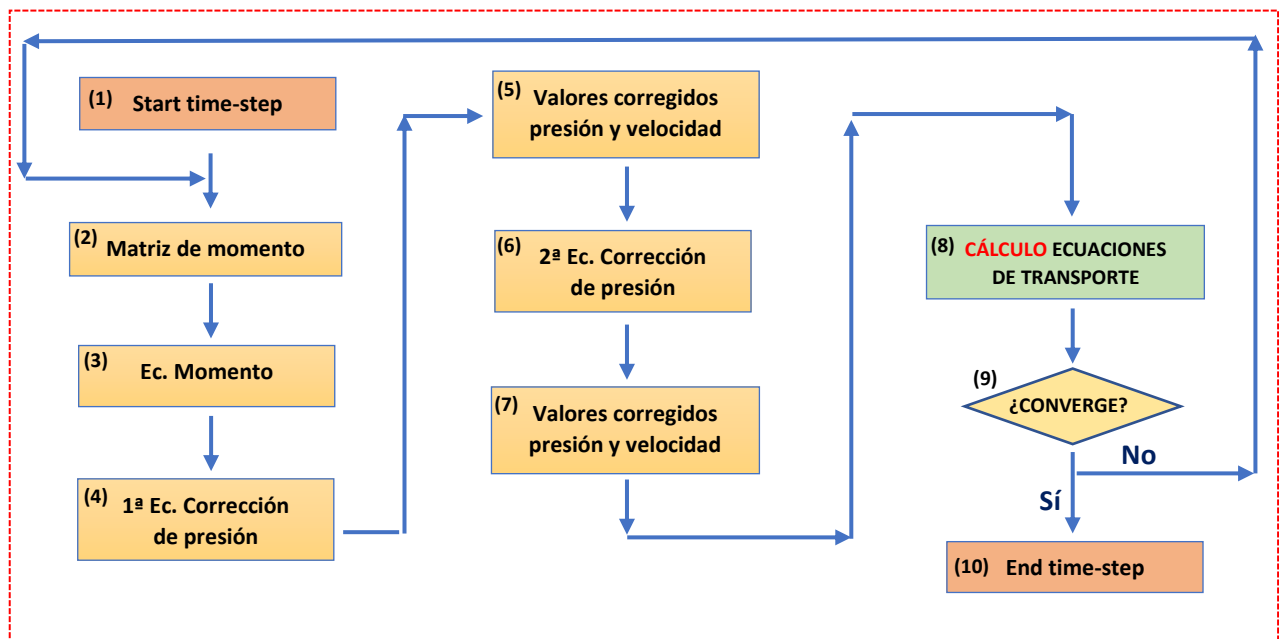


Figura 25. Esquema iterativo del algoritmo PISO [34]

Dicho algoritmo parte de unos valores iniciales de presión y velocidad, a partir de tales condiciones se construye la matriz de momento, y se resuelve su ecuación implícita en el *step* (3), obteniendo así la presión. Seguidamente, en el *step* (4) se deriva la ecuación de corrección de presión y se obtienen las correcciones de presión y velocidad del *step* (5).

Con estos valores se deriva de nuevo otra ecuación de corrección presión y se obtienen las magnitudes corregidas. Por último, se aplican las ecuaciones de transporte y se comprueba si convergen los resultados. De no hacerlo se cogen como condiciones iniciales los valores de presión y velocidad del *step* (7) y se repite nuevamente el algoritmo hasta que el error entre dos iteraciones sea lo suficientemente pequeño como para dar por válida la solución.

### 4.3.1 Estrategia de cálculo

Los cálculos van a ser lanzados desde el clúster de computadoras RÍGEL de la Universitat Politècnica de València. El número de núcleos o *cores* empleados para llevar a cabo las simulaciones es de 48.

La estrategia de cálculo de la simulación se va a realizar en base al *timeline* de la Figura 26, en donde se muestran los tiempos de activación de las distintas estrategias de mallado y los instantes en los que se debe activar aproximadamente la inyección del combustible. La idea de base consiste en activar en primer lugar el *Grid scaling*, teniendo así una malla más gruesa de lo que lo será luego; seguidamente se activan el *Fix embedding* (FE) y el AMR para obtener más precisión en los datos y así optimizar el tiempo computacional.

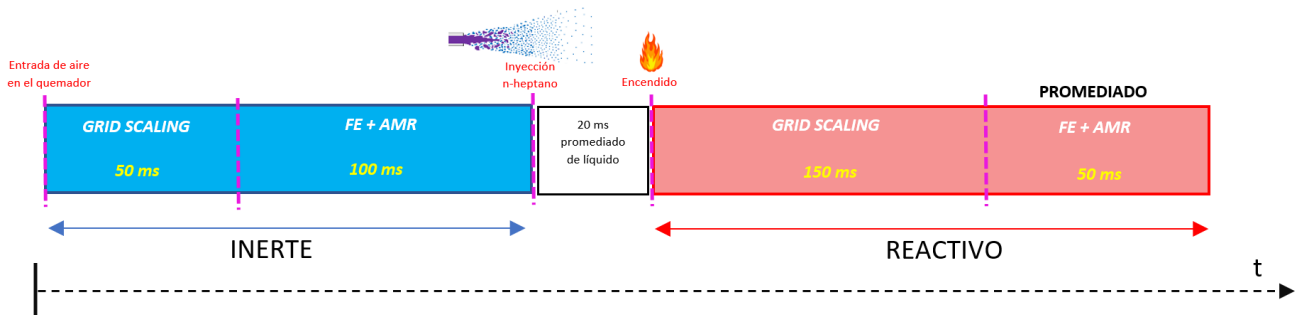


Figura 26. Timeline de la estrategia de mallado durante la simulación

En inerte se arranca la inyección de aire y se dejan 50 milisegundos con *grid scaling* para estabilizar; seguidamente se añaden 100 milisegundos sin *grid scaling* y con FE y AMR activos antes de la inyección del combustible. Se promedian las parcelas de líquido durante 20 ms, se provoca el encendido y comienza el caso reactivo. Posteriormente se calculan 150 milisegundos mediante el *grid scaling*, y, para terminar, se activan FE y AMR para promediar los últimos 50 milisegundos.

## 4.4 POSTPROCESADO

Tras finalizar la etapa de simulación comienza la etapa de postproceso, en la que se van a interpretar los resultados, a fin de obtener un análisis de los mismos y poder extraer conclusiones. Es interesante resaltar que CONVERGE y la mayoría de programas de cálculo CFD permiten gestionar los ficheros de resultados, ofreciendo la posibilidad al usuario de exportarlos en el formato que se desee, para poder aplicar posteriormente las rutinas de postproceso correspondientes.

Existen múltiples programas que permiten realizar el postproceso de los resultados como pueden ser Matlab o Python; es posible que el propio software de cálculo CFD contenga de forma integrada la posibilidad de postprocesar información, como por ejemplo ocurre con CONVERGE.

La información de los resultados de la fase gas del setup de estudio va a ser postprocesada con una rutina implementada en el entorno de Matlab. Además, se va a hacer uso del software TECPLOT de CONVERGE, el cual permite visualizar en 3D las variaciones de flujo dentro del quemador KIAI.

#### 4.4.1 Variables de estudio

Las variables que van a ser analizadas en la etapa de postproceso y tras la etapa de simulación van a ser las correspondientes a los campos de velocidad, temperatura y especies intermedias, obtenidas como consecuencia de las reacciones químicas de la combustión. Para ello, se han definido un conjunto de estaciones radiales, ubicadas en cinco posiciones axiales dentro del quemador y a una distancia  $z$  respecto del orificio de inyección. Estas estaciones se encuentran situadas en las coordenadas axiales  $z=5, 10, 20, 30$  y  $40$  mm, tal y como se muestra en la siguiente Figura 27.

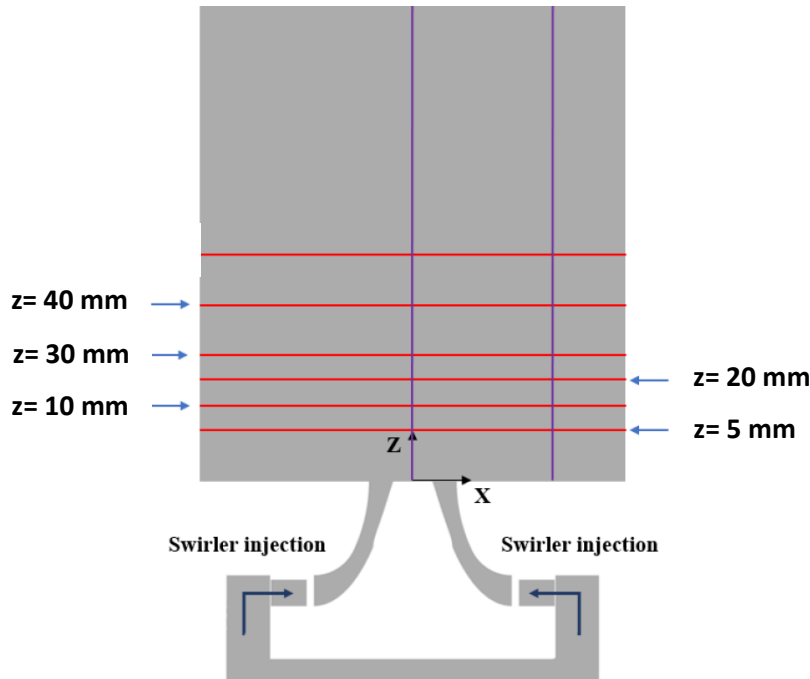


Figura 27. Estaciones radiales para las cinco posiciones axiales [41]

En lo que respecta a la velocidad, se van a obtener valores medios (promediados en el tiempo) y las componentes RMS (*Root Mean Square*) de la velocidad referidas a la fase gaseosa. Los valores cuadráticos medios RMS miden la dispersión de la velocidad respecto de los valores medios del flujo; también son conocidos como valores fluctuantes de la velocidad y se obtienen como la raíz cuadrada del promedio de la suma de los valores cuadráticos de las componentes axial, tangencial y radial, según la expresión (4.2).

$$v_{RMS} = \sqrt{\frac{v_{axial}^2 + v_{radial}^2 + v_{tangencial}^2}{3}} \quad (4.2)$$

Por último, se obtendrán los campos de temperatura, dado que es una variable a controlar y de gran importancia dentro del quemador por tratarse de un caso reactivo. Del mismo modo, se obtendrá la distribución de las fracciones másicas de las especies más significativas obtenidas durante el proceso de la combustión.



#### 4.4.2 Rutina de postprocesado

En esta sección se va a detallar cómo se ha llevado a cabo la rutina de postprocesado, con el fin de poder observar la evolución de las variables a lo largo de las estaciones axiales y en la dirección radial del quemador. Es conveniente destacar que CONVERGE dispone de una *User Defined Function* (UDF), la cual permite ir registrando las componentes medias de la velocidad radial (X), tangencial y axial, y almacenarlas respectivamente en *BAR\_U*, *BAR\_V* y *BAR\_W*. Además, del mismo modo, permite almacenar las componentes fluctuantes de la velocidad en *RMS\_U*, *RMS\_V* y *RMS\_W*. Mediante una frecuencia de escritura *twrite\_post* de 0.1 milisegundo, establecida en el fichero de valores de entrada *inputs.in*, CONVERGE graba los resultados en formato .h5, de tipo binario, los cuales son transformados a ficheros de texto con formato de columnas .col mediante una herramienta de conversión de extensiones que ofrece CONVERGE, mostrada en la Figura 28.

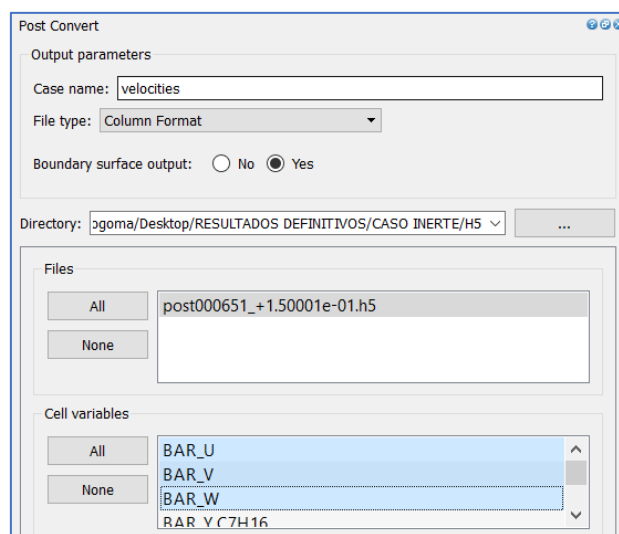


Figura 28. Herramienta de conversión de extensiones de CONVERGE

De esta manera, se permite ordenar y mostrar los valores de las velocidades y demás variables de interés predispuestas en columnas, tal y como puede observarse en la Figura 29.

velocities000132\_5\_00022e-02.col: Bloc de notas

Archivo Edición Formato Ver Ayuda

5.000221e-02 column format file

x	y	z	volume	BAR_U	BAR_V	BAR_W	RMS_U	RMS_V	RMS_W
8.0625001e-03	-7.6874999e-03	-1.8494505e-02	5.2734536e-11	-3.0835182e+01	-1.2538344e+01	2.4516064e+01	2.9528339e+00	2.8106124e+00	3.5116353e+00
8.0625001e-03	-7.6874999e-03	-1.8119505e-02	5.2734244e-11	-3.2334953e+01	-1.4028921e+01	2.5785616e+01	3.1238372e+00	2.8798752e+00	3.7693532e+00
8.4374998e-03	-8.8124998e-03	-1.9244505e-02	5.2734172e-11	-3.3275314e+01	-1.2174434e+01	2.2399488e+01	3.0968692e+00	2.7094469e+00	3.2252772e+00
8.4374998e-03	-8.8124998e-03	-1.8869505e-02	5.2734405e-11	-3.3727947e+01	-1.2740289e+01	2.2880030e+01	3.0944240e+00	2.7432330e+00	3.3643308e+00
8.4374998e-03	-8.4374998e-03	-1.9244505e-02	5.2734143e-11	-3.1863337e+01	-1.2378856e+01	2.2986553e+01	3.0926297e+00	2.7633729e+00	3.2485728e+00
8.4374998e-03	-8.4374998e-03	-1.8869505e-02	5.2734375e-11	-3.2913109e+01	-1.3302269e+01	2.3599611e+01	3.1015651e+00	2.7798123e+00	3.2943454e+00
8.8124998e-03	-8.8124998e-03	-1.9244505e-02	5.2734201e-11	-3.3447571e+01	-1.3348144e+01	2.2100027e+01	3.0749555e+00	2.7881567e+00	3.2281916e+00
8.8124998e-03	-8.8124998e-03	-1.8869505e-02	5.2734434e-11	-3.3548447e+01	-1.3500086e+01	2.2599333e+01	3.0780544e+00	2.7729428e+00	3.4349749e+00
8.8124998e-03	-8.4374998e-03	-1.9244505e-02	5.2734172e-11	-3.2279854e+01	-1.3851731e+01	2.2807302e+01	3.0910547e+00	2.771225e+00	3.2771225e+00
8.8124998e-03	-8.4374998e-03	-1.8869505e-02	5.2734405e-11	-3.2870075e+01	-1.4137321e+01	2.3081610e+01	3.0811927e+00	2.7731872e+00	3.3383110e+00
8.4374998e-03	-8.8124998e-03	-1.8494505e-02	5.2734463e-11	-3.4346405e+01	-1.3051670e+01	2.3623672e+01	3.1440330e+00	2.8363631e+00	3.5131998e+00
8.4374998e-03	-8.8124998e-03	-1.8119505e-02	5.2734172e-11	-3.4619720e+01	-1.3228029e+01	2.4516665e+01	3.0924211e+00	2.9452233e+00	3.6548755e+00
8.4374998e-03	-8.4374998e-03	-1.8494505e-02	5.2734434e-11	-3.3529831e+01	-1.3699231e+01	2.4380041e+01	3.1831410e+00	2.8663399e+00	3.5343628e+00
8.4374998e-03	-8.4374998e-03	-1.8119505e-02	5.2734143e-11	-3.4040760e+01	-1.4394542e+01	2.4882397e+01	3.1568241e+00	2.8339033e+00	3.5145509e+00
8.8124998e-03	-8.8124998e-03	-1.8494505e-02	5.2734492e-11	-3.4111303e+01	-1.3264979e+01	2.3494637e+01	3.0664201e+00	2.8969779e+00	3.5513325e+00
8.8124998e-03	-8.8124998e-03	-1.8119505e-02	5.2734201e-11	-3.3954838e+01	-1.2870947e+01	2.4651459e+01	3.0205255e+00	3.1023390e+00	3.8553112e+00
8.8124998e-03	-8.4374998e-03	-1.8494505e-02	5.2734463e-11	-3.3474743e+01	-1.4271294e+01	2.3940502e+01	3.1414745e+00	2.8430381e+00	3.5721707e+00
8.8124998e-03	-8.4374998e-03	-1.8119505e-02	5.2734172e-11	-3.3777466e+01	-1.4529737e+01	2.4576948e+01	3.0921493e+00	2.9508471e+00	3.5869689e+00

Figura 29. Variables predispuestas en Column Format .col

Una vez llegado a este punto, entra en juego la rutina de postprocesado de Matlab, la cual se encarga de leer cada una de las variables de la fase gas predefinidas en las columnas anteriores, y las grafica en las estaciones axiales y radiales que el usuario desee.

En primer lugar, es necesario definir en el código la ruta del directorio asociada al archivo .col, para ello, se indica además el instante de la simulación del archivo .h5 en milisegundos, según la Figura 30.

```
%% INPUTS DIRECTORIES
% Main folder which has ALL the data for each simulation
main_dir = 'C:\Users\logoma\Desktop';
addpath(genpath(main_dir))

%% Folders
%exp_dir = [main_dir slash 'Experimental'];
dir_RANS = [main_dir slash 'REACTIVO']; % RANS folder

%% Input the Simulations to plot :
%The following variables must have the same length
Sim_names = {'reactivo'}; %'RANS_2', 'RANS_3', 'LES_4', ...

%folders for the chosen Simulations
folders = {dir_RANS}; %chose among the previous part

% time for the chosen Simulations (in ms)
Sim_col_ms = {'500'}; %times for the col files (type :char, not double)

% Marker / color for the chosen Simulations
color = {'b'};
```

Figura 30. Inputs de Matlab para lectura de archivo .col

Seguidamente, como se observa en el código de la Figura 31, y como se ha indicado anteriormente, las estaciones axiales se definen a unas distancias de estudio de 5, 10, 20, 30 y 40 mm desde el inyector.

```
%% Stations & variables to plot

fluid = {'Gas'}; % 'Gas', 'Liquid'
coord_rad = 'x'; % 'x' or 'y'
station = [5,10,20,30,40]; %Distance from the burner (in mm)
variables.Gas = {'BAR_W', 'BAR_U', 'BAR_V', 'RMS_W', 'RMS_U', 'RMS_V', 'TEMPERATURE'};
```

Figura 31. Estaciones axiales y variables que se desean graficar

Posteriormente, el código comienza a extraer la información de las variables del archivo .col y se establecen los planos de estudio, acorde con el código de la Figura 32, definiendo para ello la coordenada z (axial) y la coordenada x (radial), añadiendo una tercera coordenada fijada a cero ( $new\_y = 0$ ), que permite definir los planos y realizar correctamente la interpolación en tres dimensiones.

```

function Gas = Extraction_COL(COL,station,variables,coord_rad,n)
%% Z
ind_z = strcmp(COL.colheaders(:),'z');
COL.data(:,ind_z) = COL.data(:,ind_z)*1000; %Conversion m to mm
z = COL.data(:,ind_z);

%% COORDENADA RADIAL, dependerá de lo que elijas en los inputs
ind_x = strcmp(COL.colheaders(:),coord_rad);
COL.data(:,ind_x) = COL.data(:,ind_x)*1000; %Conversion m to mm
x = COL.data(:,ind_x);

new_x = linspace(-60,60,n)';

%% LA OTRA COORDENADA RADIAL (la que definirá el plano)
if strcmp(coord_rad,'x')
    ind_y = strcmp(COL.colheaders(:),'y');
elseif strcmp(coord_rad,'y')
    ind_y = strcmp(COL.colheaders(:),'x');
end
COL.data(:,ind_y) = COL.data(:,ind_y)*1000;
y = COL.data(:,ind_y);

new_y = 0;
    
```

Figura 32. Coordenadas que definen los planos de estudio

Precedentemente, se amplía el *meshgrid* a una malla 3D, y se establece una interpolación tipo *griddata*, con dos bucles *for*, uno para las estaciones y otro para las variables, según la Figura 33.

```
%%
Gas = struct;
Gas.X = new_x;

for i = 1:length(station)
    s = station(i);
    new_z = s;
    [xq,yq,zq] = meshgrid(new_x,new_y,new_z);
    for var = variables
        ind = strcmp(COL.colheaders(:),var);
        val = COL.data(:,ind);
        valq = griddata(x,y,z,val,xq,yq,zq);
        if ismember(var,{'u','BAR_U','v','BAR_V'})
            simet =0;
        else
            simet =1;
        end
        val_mean = radial_avg(valq',new_x, simet);
        Gas.Z.(['Z' num2str(s) 'mm']).(char(var)) = val_mean;
    end
end
end
```

Figura 33. Bucles *for* e interpolación de los datos

Finalmente, se importa el archivo *.col* asociado al instante de la simulación que se desee y se ejecuta la siguiente estructura concatenada (Figura 34).

```
%% Import Simulations
SIM = struct;
n = 100; % number of points to plot for gas part
for i=1:length(Sim_names)
    file_col = char(strcat(folders(i),slash,Sim_names(i),'_',Sim_col_ms(i),'.col'));
    COL = importdata(file_col);
    Gas = Extraction_COL(COL,station,variables.Gas,coord_rad,n);
    SIM.(char(Sim_names(i))).Gas = Gas;
    SIM.(char(Sim_names(i))).marker = char(color(i));
    SIM.(char(Sim_names(i))).Name = char(Sim_names(i));
end
```

Figura 34. Estructura concatenada para importar y leer el archivo *.col*

En último lugar, se plotean las gráficas deseadas mediante la estructura de código de la Figura 35.

```
%% PLOTTING
for f = fluid
    for var=variables.(char(f))
        figure('Name',char(var))

        for sim = Sim_names
            Sim = SIM.(char(sim));
            st = SIM.(char(sim)).(char(f));
            plot_var(Sim,st,char(f),var)
        end
        legend
    end
end
```

Figura 35. Estructura de “plotting” de gráficas de resultados

Se trata de un *script* en el que la función *plot\_var* se implementa siguiendo la estructura de la Figura 36, mostrada a continuación.

```
function [] = plot_var(Sim,st,fluid,var)

X = st.X;
m = fieldnames(st.Z);
for i=1:numel(m)
    subplot(numel(m),1,i)
    Y = st.Z.(char(m(i))).(char(var));
    plot(X,Y,Sim.marker,'DisplayName',Sim.Name)
    xlabel('R (mm)')

    ylabel(char(var))
    xlim([-60 60]);
    hold on
end
end
```

Figura 36. Función *plot\_var* para el plotting de gráficas de resultados



## **CAPÍTULO 5: RESULTADOS**

En este capítulo se van a mostrar los resultados de la simulación del proceso de combustión del quemador de estudio KIAI, mediante el modelo de atomización TAB y el mecanismo químico de combustión LBV (Laminar Burning Velocity).

En un primer lugar se van a analizar los campos de velocidades y se van a comparar los mismos con los obtenidos para el caso inerte sin reacción; del mismo modo, se identificarán las diferentes estructuras turbulentas que vayan apareciendo a lo largo del quemador durante el proceso de combustión.

### **5.1 ANÁLISIS DEL CAMPO DE VELOCIDAD**

En las Figuras 37 y 38 pueden observarse las componentes medias y fluctuantes del campo de velocidad en la dirección axial del quemador; se aprecia como el máximo valor de la velocidad se alcanza a la salida del swirler, nada más entrar al quemador, tanto para el caso inerte como para el caso reactivo. Esta característica de velocidad máxima de flujo es conocida como SWJ (*Swirled Jet*), la cual presenta una alta turbulencia, debido a la interacción del aire con las gotas atomizadas de combustible tras su inyección.

Además, puede apreciarse claramente cómo la velocidad va disminuyendo progresivamente conforme se avanza a lo largo de la cámara de combustión al entrar en contacto con el aire de partida presente en el propio quemador, debido a la fricción y al intercambio de la cantidad de movimiento.

Por otra parte, como se indicó en la Sección 2.2.2, la geometría del swirler y los elevados números de swirl favorecen la presencia de una zona en la que la componente media axial adquiere valores negativos, llamada zona de recirculación toroidal central CTRZ (*Central Toroidal Recirculation Zone*), la cual favorece la estabilidad en la combustión, propiciando la ignición y evitando el desprendimiento de llama.

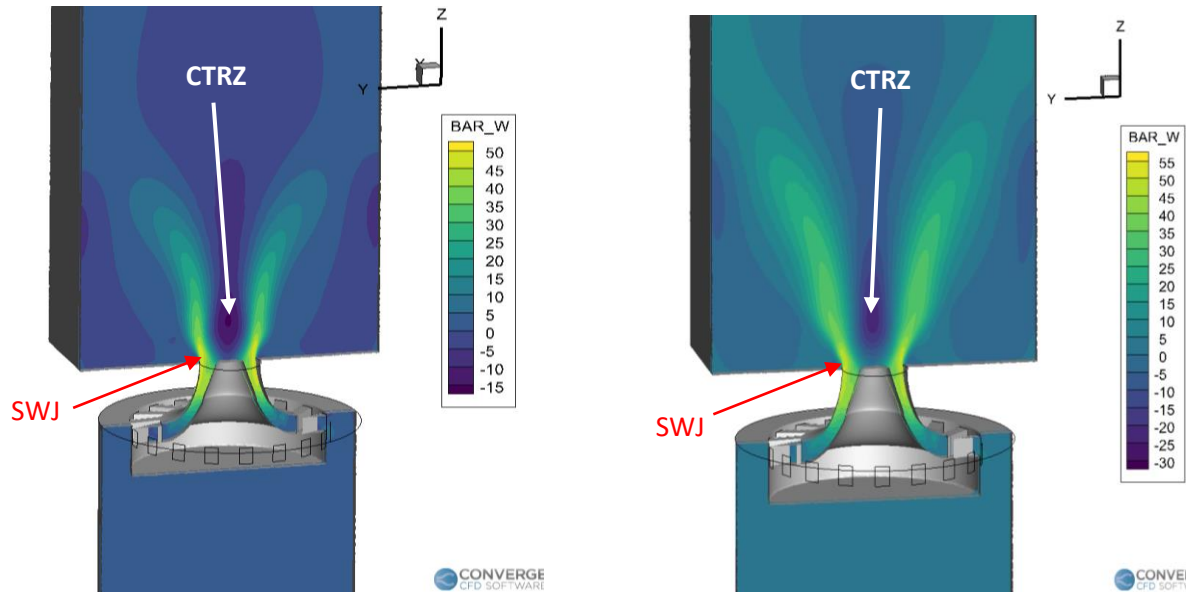


Figura 37. Componentes medias de la velocidad de la fase gas en la dirección axial para los casos inerte (izquierda) y reactivo (derecha)

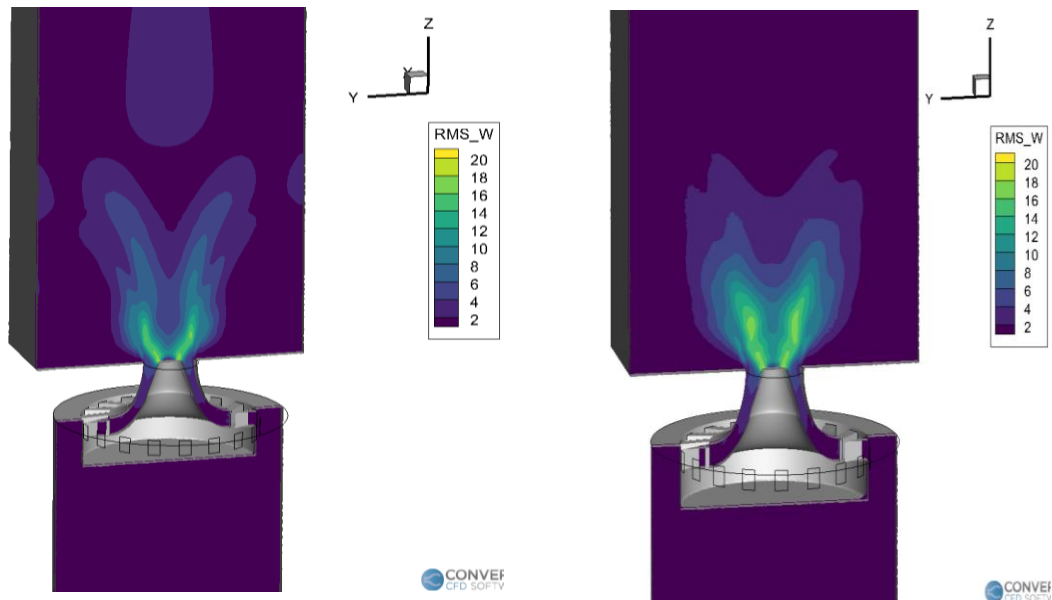


Figura 38. Componentes fluctuantes de la velocidad de la fase gas en la dirección axial para los casos inerte (izquierda) y reactivo (derecha)



Además, según se observa en las gráficas de las Figuras 39 y 40, obtenidas mediante la rutina de postprocesado de Matlab, para el caso reactivo se tiene una mayor velocidad en la dirección radial a medida que aumenta la componente axial.

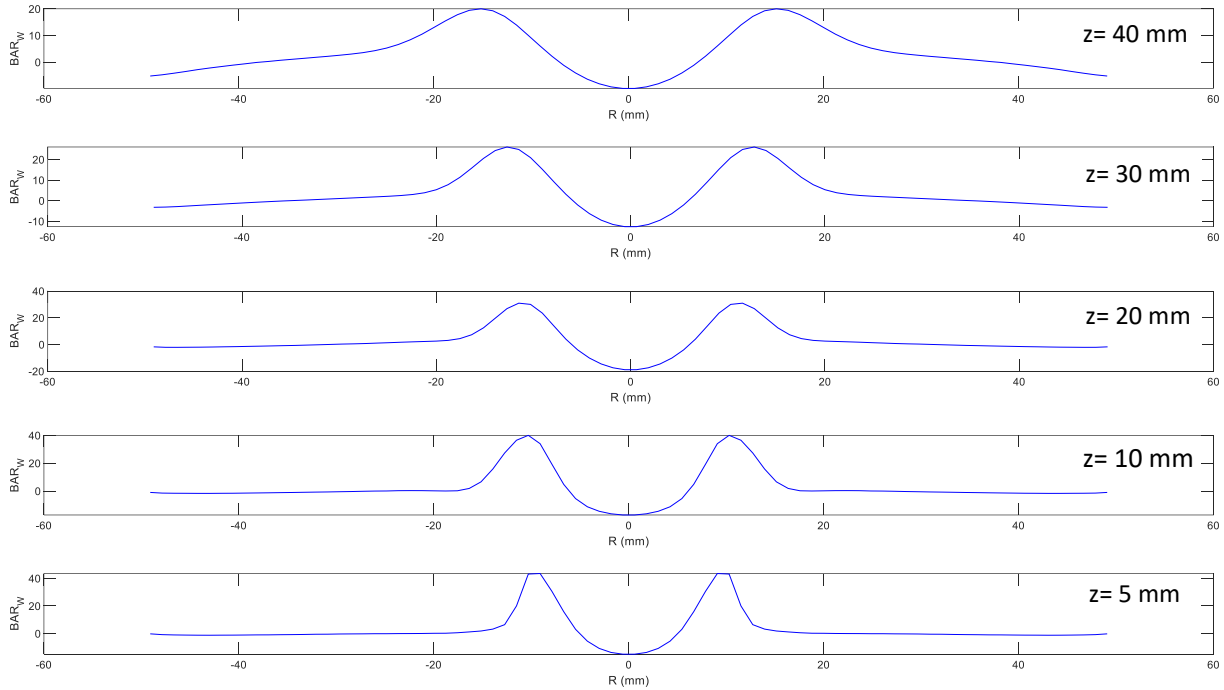


Figura 39. Estaciones axiales para la componente media de la velocidad axial del caso inerte

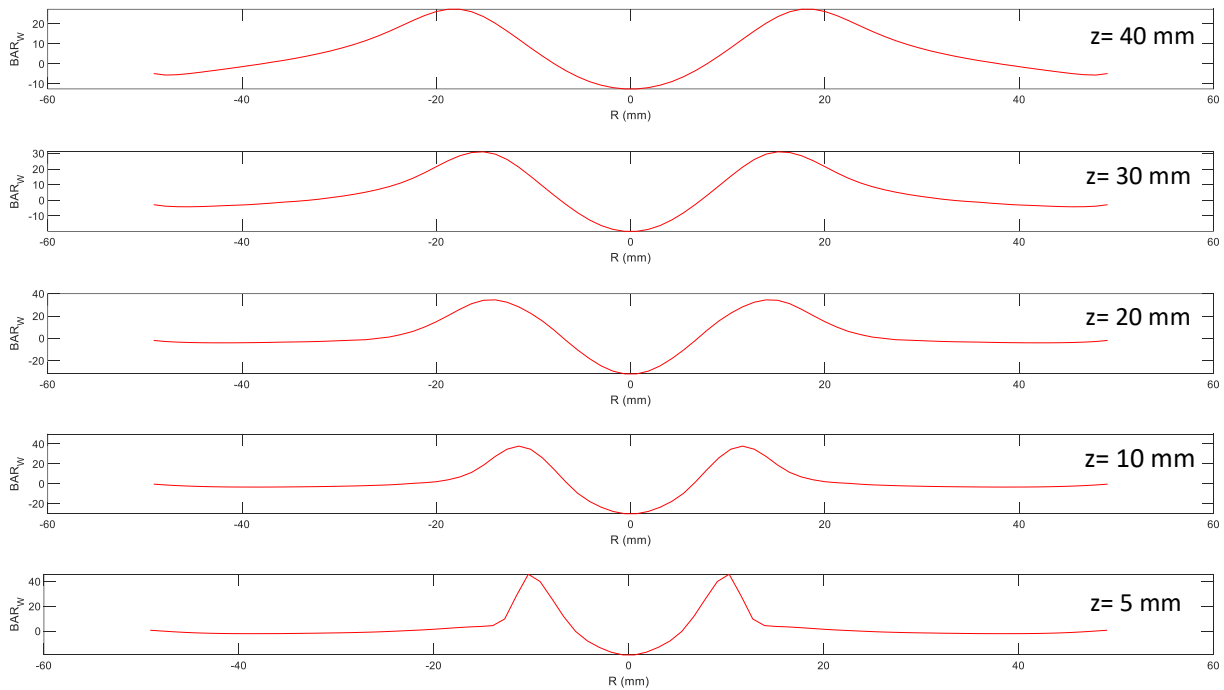


Figura 40. Estaciones axiales para la componente media de la velocidad axial del caso reactivo

## 5.2 ANÁLISIS DE LA TEMPERATURA Y ESPECIES

El proceso de combustión se caracteriza principalmente por la liberación de calor de la energía química contenida en el combustible durante el proceso de su oxidación. La temperatura es una variable muy a tener en cuenta en los procesos de combustión, ya que la formación de NOx depende de las máximas temperaturas de llama alcanzadas en dicho proceso, como se vio en la Sección 2.4.

Es importante tener la llama estabilizada en una zona correcta, para no quemar por sobrecalentamiento el inyector o las propias paredes del quemador. En el análisis de la temperatura cabe destacar la presencia de una especie trazadora de las zonas de reacción, como es el OH; se trata de una especie indicadora de la zona de reacción y se corresponde con las altas temperaturas. Esta especie aparece en el análisis de resultados con la etiqueta de *MASSFRAC\_OH*, ya que representa la fracción másica de OH.

Se realizaron simulaciones provocando el encendido en la CTRZ, como se observa en la Figura 41, quedando la llama estabilizada demasiado cerca del inyector, en comparación con los resultados experimentales, donde la llama estabilizaba más aguas abajo. Por tanto, se descartó adoptar esta simulación como solución definitiva debido a la problemática de la posibilidad de quemar la boquilla por sobrecalentamiento.

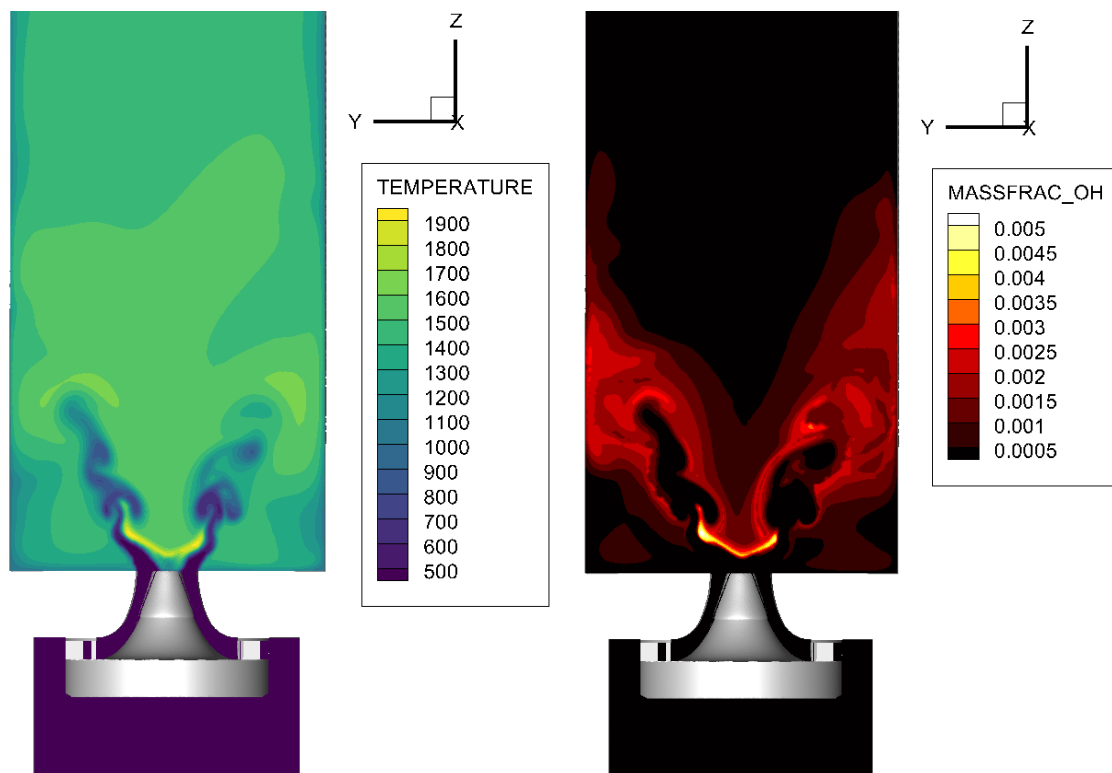


Figura 41. Combustión del quemador KIAI con llama generada en la CTRZ

Por tanto, se decide situar el punto de ignición lo más parecido a los resultados experimentales, concretamente en la zona de recirculación de las esquinas, conocida como Corner Recirculation Zone (CRZ), con tal de estabilizar la llama en una posición axial más alejada del inyector, y evitar así problemas de sobrecalentamiento. De esta manera se obtienen los resultados definitivos en la Figura 42, considerando las paredes del quemador isotermas con una temperatura de 1000 K.

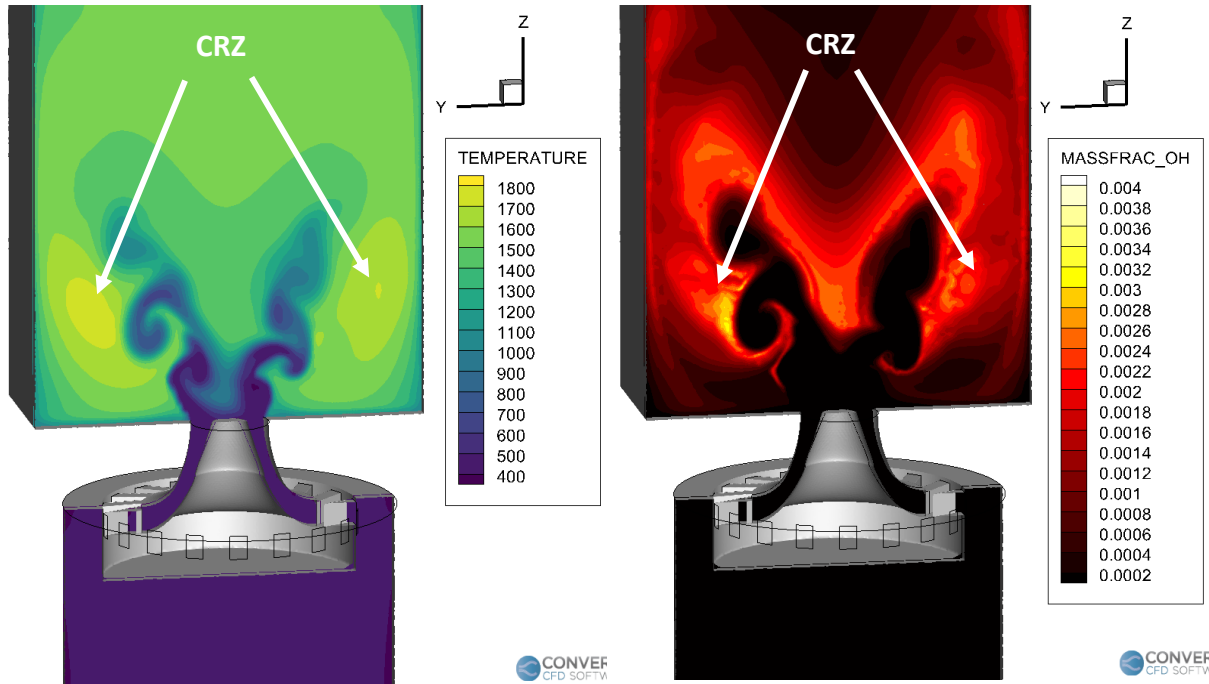


Figura 42. Temperatura y fracción másica de OH para el caso reactivo definitivo

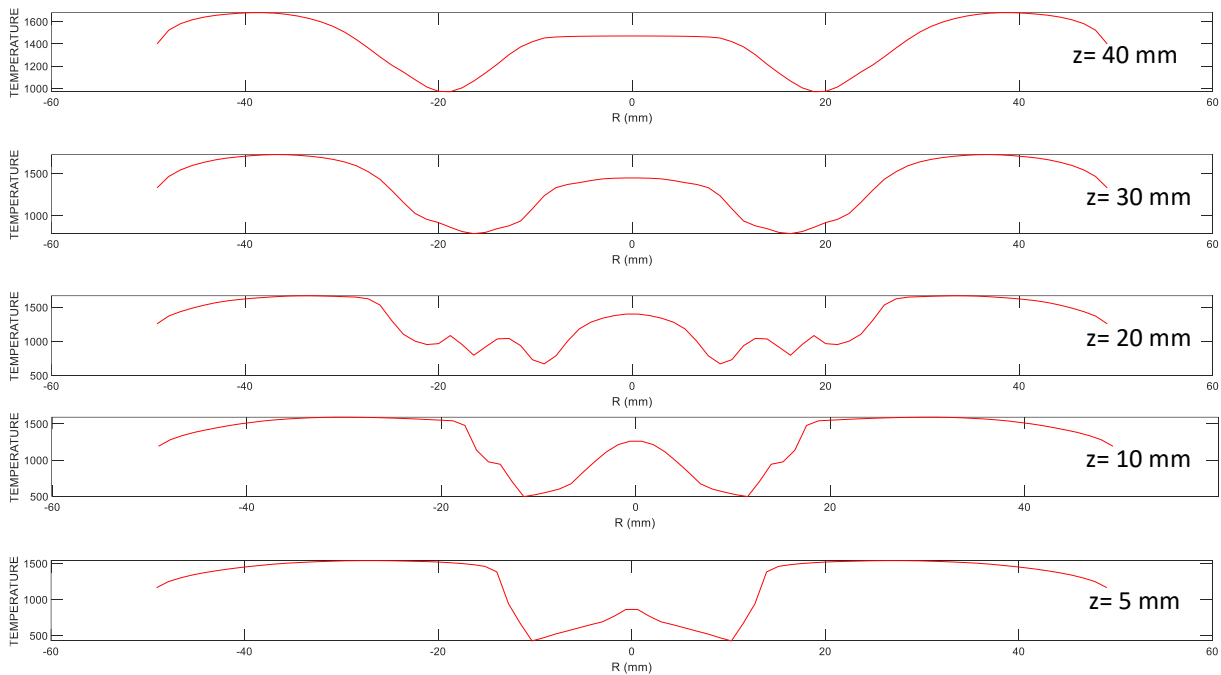


Figura 43. Evolución de la temperatura en las estaciones axiales para el caso reactivo

Como puede verse en la Figura 42, la llama queda estabilizada en una posición razonable que permite garantizar una combustión estable y sin problemas de sobrecalentamiento. Además, se observa claramente, en la Figura 43, la transición a la alta temperatura en la dirección radial del quemador, de forma que se tiene una zona controlada de alta temperatura en torno a  $z=30-40$  mm y una posición radial entre 30 y 40 mm.

Cabe destacar que, al encontrarse la llama más separada del inyector, se tienen zonas de dosado relativo pobres (Figura 44), por lo que se alcanzan temperaturas máximas relativamente bajas en torno a 1700 K y 1800 K, inferiores a la adiabática de llama ( $\sim 2100$  K) y que evitan la formación de NOx, tal y como estaba previsto, pues se está trabajando con un sistema LDI.

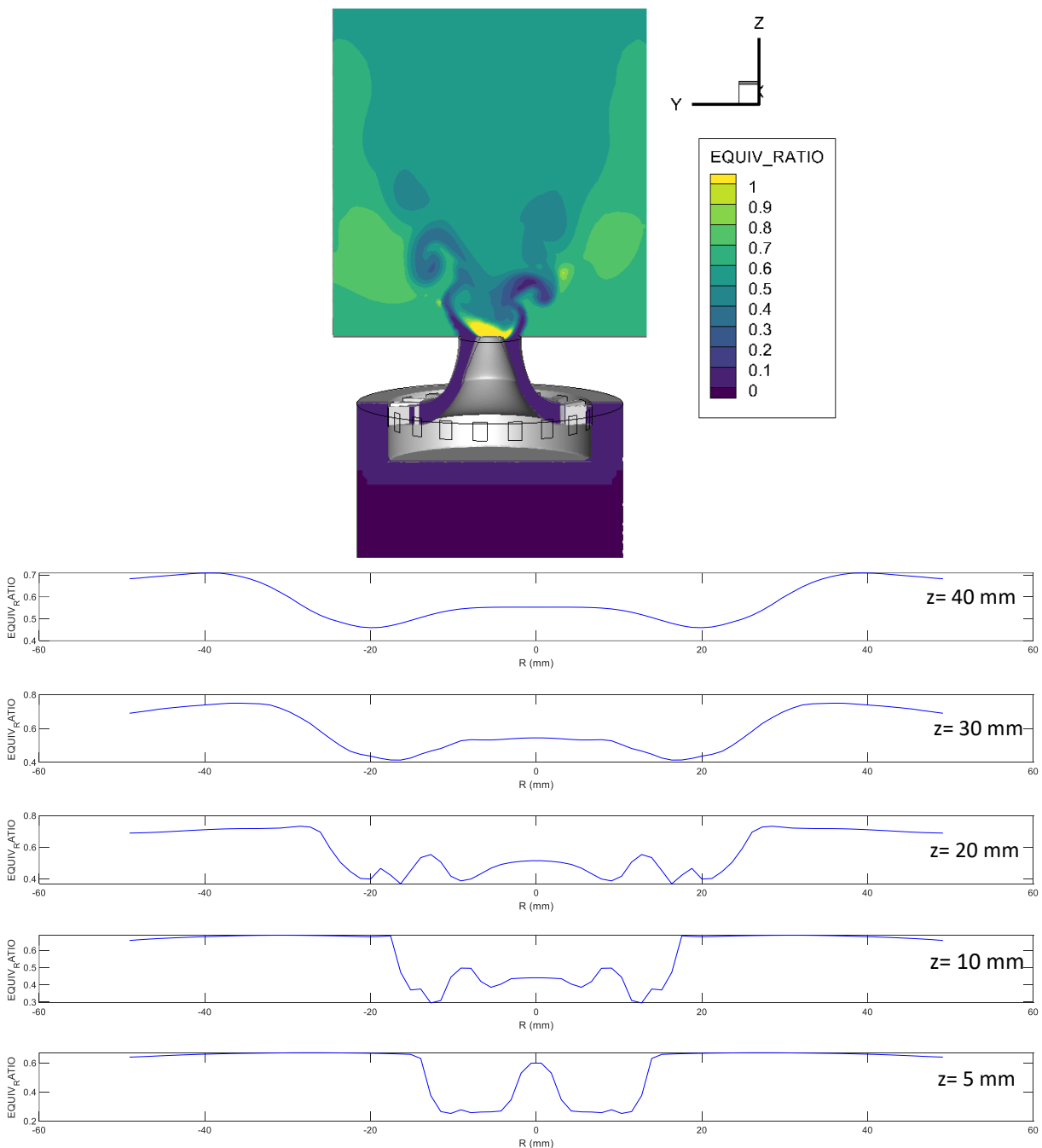


Figura 44. Dosado relativo a lo largo del quemador

Se observa como a la salida del inyector, por la presencia de las gotas de líquido de combustible, el dosado es mayor, sin embargo, queda en un valor de en torno a  $\phi \sim 0.65$  a lo largo del quemador, siguiendo la filosofía de reducción de NOx propia de los quemadores LDI.

Por último, se han obtenido también las componentes medias y fluctuantes de la temperatura, mostradas en la Figura 45. Puede observarse como hay ciertas fluctuaciones a la salida de los jets, pese a que se esté trabajando con un modelo de turbulencia U-RANS.

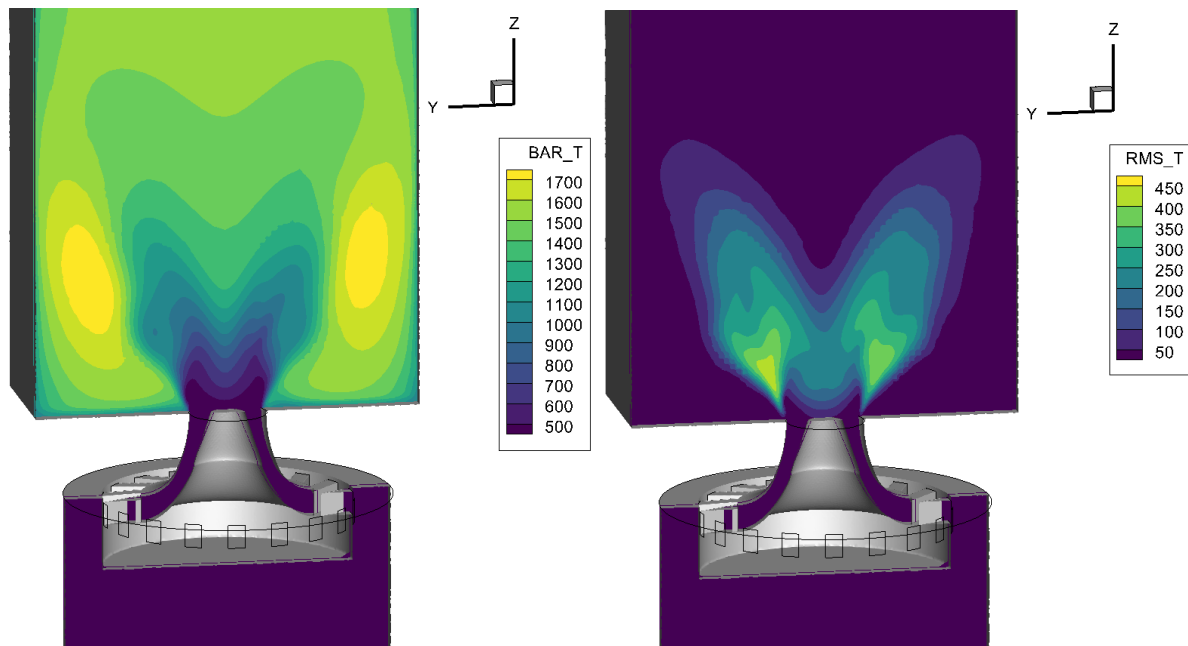


Figura 45. Componentes medias y fluctuantes de la temperatura para el caso reactivo

Por último, como ocurre en cualquier reacción de combustión, se tienen principalmente, como productos de las reacciones químicas que intervienen, la formación de  $\text{CO}_2$  y vapor de agua  $\text{H}_2\text{O}$ , así como la presencia de especies menores intermedias.

Como se observa en la Figura 46, los gases quemados salen satisfactoriamente por el escape; además, cabe destacar la semejanza que presentan las gráficas del  $\text{CO}_2$  y el vapor de agua con la gráfica del indicador OH de la zona de reacción, ya que estas especies son productos mayores de las reacciones químicas que tienen lugar en tales zonas.

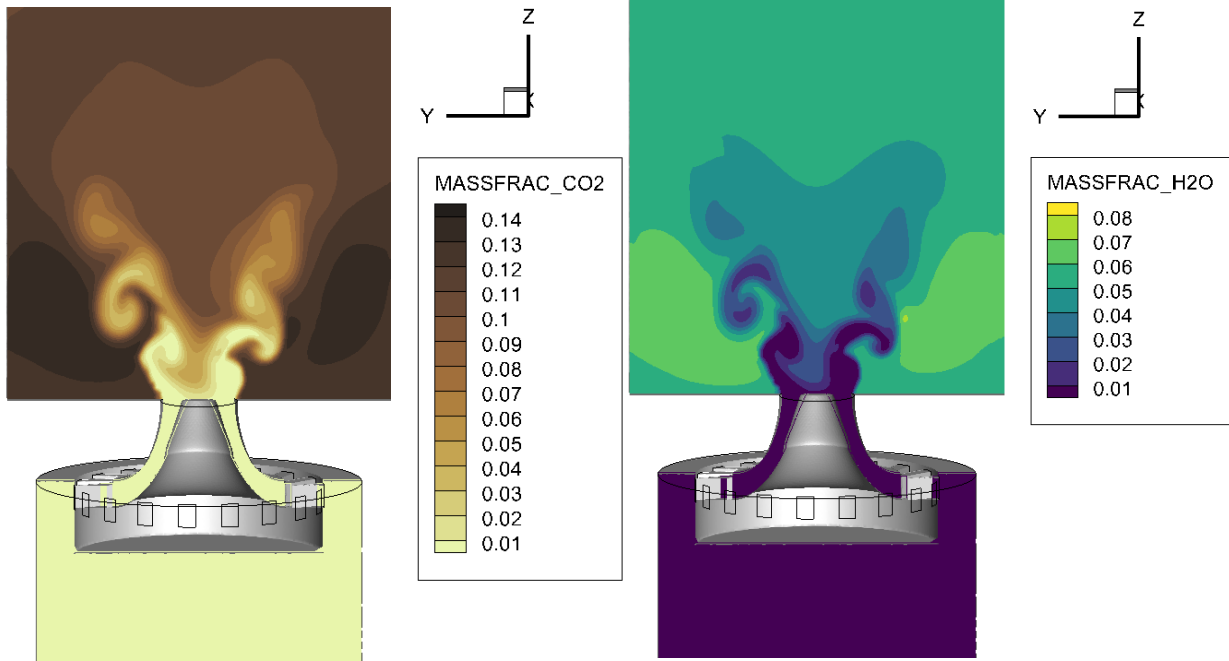


Figura 46. Especies  $CO_2$  y vapor de agua  $H_2O$  productos de la combustión

Finalmente, como especies menores cabe destacar la presencia de monóxido de carbono  $CO$  y formaldehído  $CH_2O$ , como productos de una combustión incompleta y de las reacciones de baja temperatura, respectivamente, mostradas en la Figura 47.

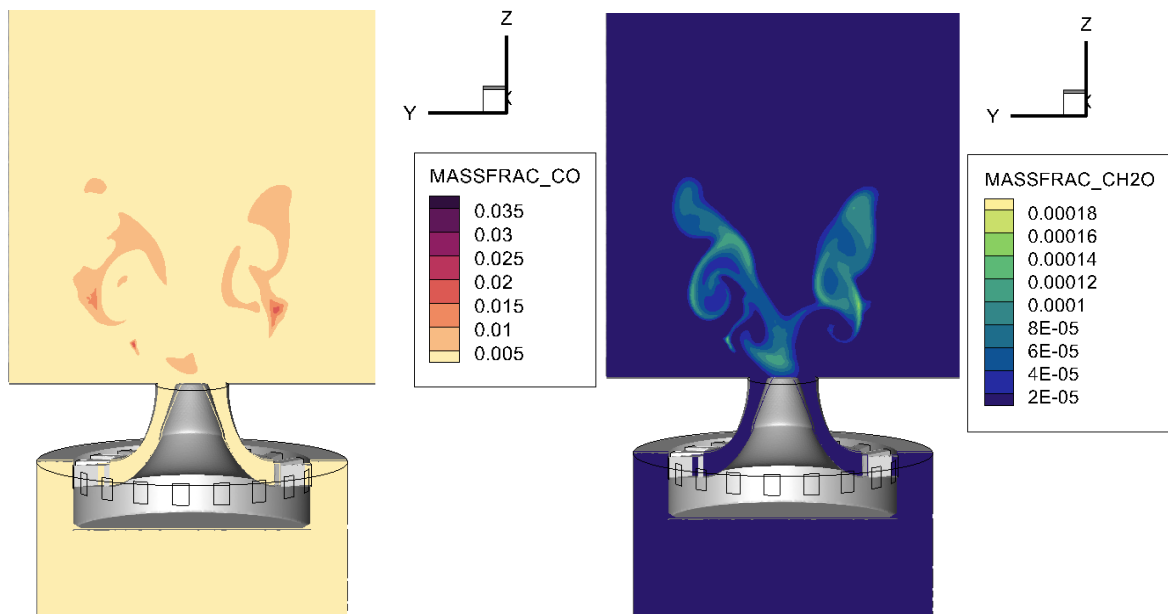


Figura 47. Especies menores intermedias de  $CO$  y  $CH_2O$

## **CAPÍTULO 6: CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS**

Las recientes y estrictas normativas medioambientales han fomentado la inversión en ciencia y tecnología para la reducción de emisiones contaminantes derivadas de los motores de aviación; de ahí la motivación que persigue el presente Trabajo Final de Máster en analizar la combustión de un quemador académico turbina de gas, siguiendo el esquema de reducción de emisiones Lean Direct Injection (LDI), mediante la aplicación del modelado de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), que tanto auge está abarcando en los últimos años.

Para ello, se realiza en primer lugar una caracterización de los esquemas de turbinas de gas de bajas emisiones y de los elementos que componen el quemador KIAI sobre el que se van a llevar a cabo las simulaciones. Además, se describe el fundamento del modelado CFD y de los modelos de turbulencia existentes para resolver las distintas escalas de turbulencia.

En segundo lugar, entra en juego la etapa de preproceso, donde se configura el setup de estudio en CONVERGE, seleccionando un modelo de turbulencia RANS k- $\epsilon$  RNG, debido al reducido tiempo computacional que requiere para resolver el problema de flujo, en comparación con el modelo LES que, aunque sea más preciso, necesita de mayor tiempo. Se configuran las estrategias de mallado que ofrece CONVERGE, destacando el AMR y el *fixed embedding*, con el objetivo de optimizar los instantes de refinamiento y poder así optimizar el coste computacional de los cálculos.

Dado que CONVERGE dispone de un mecanismo cinético-químico extendido de 88 especies, se deciden analizar los *Small Skeletal Mechanisms*, mecanismos más ligeros con el objetivo de aligerar los tiempos de cálculo reactivos. Por ello, se analizan los tiempos de ignición, y se decide emplear el mecanismo químico LBV, de 28 especies y más rápido que el extendido de CONVERGE. Seguidamente, se selecciona el modelo de atomización TAB para la inyección del combustible, y se define el algoritmo PISO para realizar la etapa del SOLVER durante la simulación.

Se modela la etapa de postprocesado, definiendo un conjunto de estaciones radiales en diferentes posiciones axiales a lo largo del quemador; para ello se configura la rutina de postprocesado en el entorno de programación de Matlab para poder representar las variables de interés a lo largo de las citadas estaciones y poder contrastar resultados.

Por último, se extraen los resultados del caso reactivo mediante Tecplot y la rutina de Matlab y se contrastan con el caso inerte, pudiendo observar las estructuras turbulentas CTRZ Y SWJ, típicas en estos tipos de quemadores con *swirler*.

En un primer intento de ignición de la combustión, se observó cómo la llama quedaba estabilizada en la CTRZ y muy cerca del inyector, generando problemas de sobrecalentamiento del mismo. Sin embargo, al desplazar la zona de ignición a la CRZ, se observó como la llama quedaba estabilizada correctamente en una coordenada axial superior, viéndose reflejada mediante el indicador OH de alta temperatura. Además, se ha visto como los productos de la combustión, como son el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>O, consiguen salir satisfactoriamente por el escape tras su formación.

Finalmente, se ha observado como el dosado relativo a lo largo del quemador es pobre, en torno a 0.65, de forma que las máximas temperaturas alcanzadas no son lo suficientemente elevadas como para propiciar la formación de NO<sub>x</sub>, quedando de esta forma justificada la eficiencia de los sistemas LDI en la reducción de emisiones contaminantes.

Por tanto, el presente Trabajo Final de Máster puede suponer el punto de arranque de líneas de investigación futuras basadas en sistemas de combustión más limpios y eficientes. Este TFM sirve para reflejar cómo la técnica del modelado CFD es, sin duda, una herramienta que ha revolucionado completamente la tecnología y una apuesta de cara al futuro en relación a su uso, coste y excelente eficiencia en sus formas de aplicación.



## CAPÍTULO 7: BIBLIOGRAFÍA

- [1] ICAO. Revista de la OACI. Volumen 63. Número 4. 2008. Recuperado 10 de junio de 2021
- [2] AENA España. Statista: portal de estadísticas para estudios de mercado
- [3] S.R. Turns (2011), An introduction to combustion: concepts and applications- Third Edition
- [4] P.Hoor y J.Borken-Kleefeld (2008). "The impact of traffic emissions on atmospheric ozone and OH"
- [5] M.V. Heitor and J.H. WhiteLaw. Unsteady Combustion. Springer. Febrero 2012
- [6] Grote J., Dall P., Oltmanns K., Stolp W. (1994) The Effect of Increased Blood Carbon Monoxide Levels on the Hemoglobin Oxygen, vol 345. Springer, Boston, 1994
- [7] M. Darecki and C. Edelstenne (2011). Flightpath 2050 Europe's Vision for Aviation
- [8] C. John Marek, D. Smith and Krishna Kundu Low Emission Hydrogen Combustors for Gas Turbines Using Lean Direct Injection. American Institute of Aeronautics and Astronautics. Arizona. July 2015
- [9] D. Barre. Simulation Numerique De L'Allumage Dans Les Chambres De Combustion Aeronautiques. PhD thesis, 2014
- [10] Landis, Fred. "Gas-turbine engine". *Encyclopedia Britannica*, 26 Dec. 2008, <https://www.britannica.com/technology/gas-turbine-engine>. Recuperado 17 de junio de 2021
- [11] Vallbona, E. (2011). Conocimientos teóricos para el alumno de piloto de transporte de la línea aérea.
- [12] The Jet Engine. Rolls Royce plc, 1986
- [13] Hossaini, M. K. (2014), "Review of the New Combustion Technologies in Modern Gas Turbines", in Progress in Gas Turbine Performance, Dr. Ernesto Benini (Ed.)
- [14] A. H Lefebvre and Ballar. D. Gas Turbine Combustion. Alternative Fuels and Emissions. 1998.
- [15] R. G. Bhuvana (2018). *CFD analysis on swirl angle effect in gas turbine combustion chamber* IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 402 012206
- [16] S. Menon and R. Ranjan. Spray combustion in swirling flow. *Coarse Grained Simulation and Turbulent Mixing*, pages 351–392, 2016
- [17] Y.A. Eldrainy, J.J.M. Ridzwan. Prediction of the flow inside a micro gas turbine combustor. *Jurnal Mekanikal* June 2008, No. 25, 50 – 63

- [18] Beer JM, and N. A. Chigier. 1972. *Combustion Aerodynamics*. New York: Halsted Press Division, Wiley
- [19] S. Etemad and B. C. Forbes (1995). *Cfd modeling of a gas turbine combustor air swirler effect, computational fluid dynamics in aero-propulsion*
- [20] Wuithier, P. (1971). *El petróleo. Refino y tratamiento químico. Vol 1*. Madrid: Ediciones CPSA, S.A. Recuperado 22 de junio de 2021
- [21] E. J. Lee, S. Y. Oh y otros. (2010). *Measuring air core characteristics of a pressure-swirl atomizer via a transparent acrylic nozzle at various Reynolds numbers*, *Experimental Thermal and Fluid Science*, Volume 34, Issue 8
- [22] J. Ebner, P. Schober y otros (2004). *Modelling of sheardriven liquid wall films: effect of accelerated air flow on the film flow propagation*. *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, 4(3-5):183–190, 2004
- [23] M.L. Brusseau, S.A. Musil, (2019). *Atmospheric Pollution, in Environmental and Pollution Science (Third Edition)*. Recuperado 22 de junio de 2021
- [24] P. Glarborg (2009). *Chapter 11-Detailed kinetic Mechanism of Pollutant Formation in Combustion Processes*, *Computer Aided Chemical Engineering*, Elsevier, Volume 45
- [25] Ahmed SF, Santner J, Dryer FL, Padak B, Farouk TI (2016). *Computational study of NOX formation at conditions relevant to gas turbine operation, Part 2: NOX in high hydrogen content fuel combustion at elevated pressure*. *Energy Fuels* 30(9):7691–7703
- [26] M. Jadidi, S. Moghtadernejad, A. Dolatadabi (2015). *A Comprehensive Review on Fluid Dynamics and Transport of Suspension/Liquid Droplets and Particles in High-Velocity Oxygen-Fuel (HVOF) Thermal Spray*
- [27] G. S. Samuelsen, J. Brouwer, M. A. Vardakas. (2012). "Experimental and modeling investigation of the effect of air preheat on the formation of NOx in an RQL combustor"
- [28] Gokulakrishnan, P., Ramotowski, M. J., Gaines, G., Fuller, C., Joklik, R., Eskin, L. D., Klassen, M. S., and Roby, R. J. (May 30, 2008). "A Novel Low NOx Lean, Premixed, and Pre-vaporized Combustion System for Liquid Fuels." *ASME. J. Eng. Gas Turbines Power*. Recuperado 24 de junio de 2021
- [29] X.Ren, C.J.Sung, and H.C. Mongia (2018) "On Lean Direct Injection Research" , *Energy for Propulsion: A Sustainable Technologies Approach*, Springer Verlag Singapore, pág. 3-26
- [30] S. Ayache, E. Mastorakos (2013). *Investigation on the "TECLFLAM" Non-premixed Flame Using Large Eddy Simulation and Proper Orthogonal Decomposition*
- [31] J.F. Wendt (ed.), *Computational Fluid Dynamics*, 3rd ed., 15 c Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009
- [32] F. Arregui De La Cruz, E. Cabrera, R. Cobacho, J. Soriano (2017). *Apuntes de mecánica de fluidos*. Editorial Universitat Politècnica de València. Recuperado 26 de junio de 2021
- [33] H. Tinoco, H. Lindqvist, W. Frid (2010). *Numerical simulation of industrial flows, numerical simulations examples and applications in computational fluid dynamics*, Prof. Lutz Angermann (Ed.)

- [34] Versteeg, H. and Malalasekera, W. *Introduction to Computational Fluid Dynamics: The finite volume method*. 2nd Edition. Pearson Education Limited, 2007. doi: 10.2514/1.22547
- [35] Stefan H Johansson, Lars Davidson, and Erik Olsson. (1993). "Numerical simulation of vortex shedding past triangular cylinders at high reynolds number using a k-e turbulence model." *International Journal for Numerical Methods in Fluids*
- [36] Joel H. Ferziger. (1977) "Large eddy numerical simulations of turbulent flows" *AIAA Journal*
- [37] P. Esteban (2000) *Turbulent Flows*. 1st Edition. Cambridge University Press ISBN 0-521-591245-2
- [38] A. Fabregat, F. Gisbert, A. Vernet, S. Dutta (2021). "Direct numerical simulation of the turbulent flow generated during a violent expiratory event", *Physics of Fluids* 33, 035122
- [39] R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin (2019). *Finite Volume Methods. Handbook of Numerical Analysis*
- [40] ESSS- Energy Simulation and Scientific Software. *El método de Volúmenes Finitos*. Recuperado 30 de junio de 2021
- [41] Belmar Gil, M. (2020). *Computational study on the non-reacting flow in Lean Direct Injection gas turbine combustors through Eulerian-Lagrangian Large-Eddy Simulations [Tesis doctoral]*. Universitat Politècnica de València
- [42] V Moureau, JP Frenillot, G Cabot, B Renou, A Vandel, M Boukhalfa, G Lartigue, G Ribert, P Domingo, and L Vervisch. *Rapport sur les calculs d'allumage de la configuration expérimentale du projet kia1*. Livrable de la thèse CIFRE Snecma de JP Frenillot, page 129, 2010. cited p. 13, 61
- [43] Marrero-Santiago, J. (2018) "Experimental study of lean aeronautical ignition. Impact of critical parameters on the mechanisms acting along the different ignition phases." PhD thesis. INSA de Rouen
- [44] Marrero-Santiago, J. (2016). "Experimental study of airflow velocity, fuel droplet size-velocity and flame structure in a confined swirled jet-spray flame". In: *ILASS - Europe 2016, 27th Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. September. Brighton, United Kingdom
- [45] P. Pakseresht and S. Apte (2018). *Volumetric Displacement Effects in Euler-Lagrange LES of Particle-Laden Jet Flows*. Recuperado 30 de junio de 2021
- [46] Pilcher, C. and Nilsson, E. J. K. (2020). *Analysis of Important Chemical Pathways of n-heptane Combustion in Small Skeletal Mechanism*. *Energy & Fuels*. Volume 34. Pages 758-768. Recuperado 1 de julio de 2021
- [47] Pelucchi, M.; Bissoli, M.; Cavallotti, C.; Cuoci, A.; Faravelli, T.; Frassoldati, A.; Ranzi, E.; Stagni, A. (2014). *Improved kinetic model of the low-temperature oxidation of n-heptane*. *Energy Fuel.*, 28, 7178–7193
- [48] Rhie, C. and Chow, W. "Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing Edge separation". In: *AIAA Journal* 21.11 (1983), pp. 1525–1532. doi: 10.2514/3.8284



# Documento 2: PRESUPUESTO



# **PRESUPUESTO DEL TFM**

## **1. INTRODUCCIÓN**

En esta sección se detallan los costes económico asociados a la realización del presente TFM. La unidad monetaria empleada en el presupuesto es el EURO (€).

Se ha desglosado el presupuesto total en tres partidas parciales, con el fin de diferenciar la naturaleza de los costes:

- Costes asociados a los recursos humanos del proyecto, los cuales incluyen la participación de dos ingenieros senior, dos doctorandos y un estudiante de Máster Universitario en Ingeniería Industrial (MUII).
- Costes asociados a los equipos electrónicos involucrados, como ordenadores, licencias informáticas y centros de cálculo computacional, como es RÍGEL.
- Costes generales, debidos a imprevistos.

Es conveniente resaltar que se han realizado las estimaciones pertinentes y que se han aplicado los precios unitarios correspondientes a la situación actual en vigor, así como el IVA actual vigente en la nación española. Cabe añadir que el presupuesto total se obtiene como la suma de los tres presupuestos parciales mencionados, añadiendo un 50 % en costes imprevistos o cualquier coste auxiliar que pudiera contemplarse indirectamente.

## 2. PRESUPUESTO PARCIAL DE RECURSOS HUMANOS

A continuación, se detalla el personal que ha intervenido en la realización del presente Trabajo Final de Máster:

- Un estudiante de Máster Universitario en Ingeniería Industrial (MUII): encargado de la elaboración del presente informe, así como de lanzar las simulaciones y llevar a cabo el postprocesado de los resultados con la adaptación de sus rutinas. Analiza los resultados obtenidos y extrae conclusiones de los mismos.
- Un ingeniero senior como tutor del proyecto y su función es fundamental para la consecución de los objetivos. Se encarga de gestionar el proyecto y controlar el progreso del mismo. Propone soluciones y facilita la interpretación de los resultados.
- Un ingeniero senior como experto en cálculo CFD. Su involucración es elevada, ya que lleva a cabo las modificaciones en el setup computacional, lanza las simulaciones y trabaja en líneas de investigación asociadas al presente trabajo.
- Dos doctorandos Ingenieros Aeronáuticos: se encargan de colaborar en la implementación de la rutina de postprocesado y de ayudar en posibles problemas leves que puedan surgir.

En función del cómputo de horas de trabajo de cada uno de los miembros del proyecto, se recoge en la Tabla 2.1. el desglose del coste asociados a cada uno de ellos.

*Tabla 2.1. Costes asociados a los recursos humanos involucrados en el TFM*

Integrante	Dedicación [horas]	Tasa horaria [€/hora]	Coste [€]
Alumno de MUII	432	5.62	2.427,84
Ingeniero senior (tutor)	180	26	4.680,00
Ingeniero senior (experto CFD)	240	26	6.240,00
Doctorandos	40	6.67	266,8
<b>TOTAL</b>			<b>13.614,64 €</b>

Por consiguiente, el coste parcial en recursos humanos se estima en TRECE MIL SEISCIENTOS CATORCE EUROS Y SESENTA Y CUATRO CÉNTIMOS.



### 3. PRESUPUESTO PARCIAL DE RECURSOS INFORMÁTICOS

En esta partida parcial se contabilizan los gastos referidos a los equipos computacionales implicados en la elaboración del trabajo; del mismo modo, se contabilizan los costes que requieren las licencias de los softwares de cálculo y postprocesado empleados. Además, se tiene en cuenta la adquisición de un ordenador portátil particular de alto rendimiento para la elaboración del TFM.

#### 3.1 Licencias

Entre los softwares empleados, cabe destacar las licencias de pago de Matlab, CONVERGE, Tecplot y Microsoft Office 365. También se ha empleado el entorno de Python de Cantera, pero su licencia es gratuita.

En la siguiente Tabla 3.1. se muestran los precios de las licencias anuales de los softwares de pago utilizados, los cuales se multiplican por la duración del trabajo, esto es, medio año, dado que solamente se emplean durante los seis meses que dura la elaboración del proyecto.

Tabla 3.1. Costes asociados a las licencias anuales de los softwares empleados

Licencia	Precio anual [ €/año]	Rendimiento	Coste [€]
Matlab	800,00		400,00
CONVERGE + Tecplot	3.000,00	0.5	1.500,00
Microsoft Office 365	79,00		39.5,00
<b>TOTAL</b>			<b>1.939,50 €</b>

#### 3.2 Equipos de cómputo

Se va a obtener el coste de amortización que supone emplear el ordenador portátil del alumno como herramienta informática para la elaboración del proyecto. Se hace uso de la expresión (3.1) para obtener dicho coste.

$$a = \frac{V_C - V_R}{n} \quad (3.1)$$

En donde:

- $V_C$  es el valor de compra de mercado del producto informático. El precio de compra del ordenador portátil es de 1270 €.
- $V_R$  es el valor residual del producto informático considerado. Dicho valor se aproxima en un 20 % del valor de compra de mercado para el ordenador portátil.
- $n$  es el tiempo de amortización. Se considera que el ordenador portátil tiene un periodo de amortización de aproximadamente cinco años.

De esta manera, se tiene un coste de amortización para el ordenador portátil de 203,20 €.

### **3.3 Simulaciones y consumo eléctrico**

Por otra parte, es necesario obtener el coste de las simulaciones de cálculo; dichas simulaciones se han llevado a cabo durante 5 meses a través del clúster RÍGEL del CMT de la UPV, de 48 núcleos. Con ello, estimando un tiempo de las simulaciones de 864 horas y un precio por núcleo y hora de cálculo en 0.01 €/coreh, se tiene el siguiente coste de las simulaciones.

$$\text{Coste simulaciones} = 864 \text{ h} \times 48 \text{ cores} \times 0.01 \frac{\text{€}}{\text{coreh}} = 414,72 \text{ €}$$

Para el coste del suministro eléctrico se consideran las horas de dedicación de la Tabla 2.1., y se fija un precio de la electricidad en 0.15 € /kWh. De esta manera se tiene el siguiente coste en consumo eléctrico:

$$\text{Coste electricidad} = 0.2 \text{ kW} \times 892 \text{ h} \times 0.15 \frac{\text{€}}{\text{kWh}} = 26,76 \text{ €}$$

Con ello, en la Tabla 3.2. se recoge la partida presupuestaria parcial asociada a los recursos informáticos necesarios para la elaboración del presente TFM.

*Tabla 3.2. Partida presupuestaria parcial en recursos informáticos*

<b>Concepto</b>	<b>Coste [€]</b>
Licencia Matlab	400,00
Licencia CONVERGE	1.500,00
Licencia M. Office 365	39,50
Ordenador portátil	203,20
Coste simulaciones	414,72
Coste electricidad	26,76
<b>TOTAL</b>	<b>2.584,18 €</b>

Por consiguiente, el coste parcial en recursos informáticos se estima en DOS MIL QUINIENTOS OCHENTA Y CUATRO EUROS Y DIECIOCHO CÉNTIMOS.

#### **4. PRESUPUESTO PARCIAL DE COSTES GENERALES**

Esta partida presupuestaria va destinada a contabilizar los posibles gastos asociados a los imprevistos que puedan surgir durante el periodo que dura la elaboración del TFM. Este coste se estima como un 5% de la suma total del coste resultante en recursos humanos e informáticos, tal y como se detalla en la Tabla 4.1., mostrada a continuación.

*Tabla 4.1. Partida presupuestaria parcial en costes generales*

<b>Concepto</b>	<b>Coste [€]</b>
Coste en recursos humanos	13.614,64
Coste en recursos informáticos	2.584,18
Subtotal	16.198,82
<b>Total, Costes Generales (5%)</b>	<b>809,94</b>

Por consiguiente, el coste parcial en costes generales se estima en OCHOCIENTOS NUEVE EUROS Y NOVENTA Y CUATRO CÉNTIMOS.

## 5. PRESUPUESTO TOTAL DEL TFM

Una vez obtenidos las partidas presupuestarias parciales, se obtiene el presupuesto total del TFM aplicando el IVA vigente del 21 %, tal y como puede observarse en la Tabla 5.1.

Concepto	Coste [€]
Coste en recursos humanos	13.614,64
Coste en recursos informáticos	2.584,18
Costes generales	809,94
Subtotal	17.008,76
IVA (21%)	3.571,84
<b>TOTAL</b>	<b>20.580,59 €</b>

Por tanto, el presupuesto total estimado en la realización del presente Trabajo Final de Máster asciende a la expresada cantidad de **VEINTE MIL QUINIENTOS OCHENTA EUROS Y CINCUENTA Y NUEVE CÉNTIMOS.**