



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA

  
ETSI Aeroespacial y Diseño Industrial

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería Aeroespacial  
y Diseño Industrial

Modelado del proceso de combustión en un quemador  
gaseoso premezclado mediante dinámica de fluidos  
computacional

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Aeroespacial

AUTOR/A: Sevilla Sánchez, Miguel Ángel

Tutor/a: García Oliver, José María

Cotutor/a: Pastor Enguídanos, José Manuel

CURSO ACADÉMICO: 2023/2024



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



Univerisdad Politécnica de Valencia

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO

---

MODELADO DEL PROCESO DE  
COMBUSTIÓN EN UN QUEMADOR  
GASEOSO PREMEZCLADO MEDIANTE  
DINÁMICA DE FLUIDOS  
COMPUTACIONAL

---

INGENIERÍA AEROSPACIAL - TRABAJO FIN DE GRADO

Autor: Miguel Ángel Sevilla Sánchez

Tutor: José María García Oliver

Cotutor: José Manuel Pastor Enguídanos

Curso 2023/2024



## Agradecimientos

Gracias a mi familia, por no faltar nunca que les he necesitado y por su apoyo en cada paso tanto de este proyecto como de mi completa vida académica y profesional, por todo el apoyo económico y toda la estabilidad que me han podido ofrecer a lo largo de mi vida. Me siento afortunado de tener lo que tengo.

Gracias a mis amigos, tanto de mi pueblo, Tomelloso, como de la universidad, que han hecho de mi vida una experiencia inolvidable y totalmente distinta para mejor que se podría pedir. En particular, me gustaría agradecer a mi compañero Rubén, quién ha realizado el paso previo a este trabajo y me ha acompañado a lo largo de los 4 años de universidad tanto en las buenas como en las malas.

Gracias a la nueva incorporación a mi vida, Luz, por apoyarme y ayudarme cuando ya no tenía fuerzas para compaginar la vida con el trabajo y el TFG. Realmente tu empujón estos últimos meses ha sido lo que me ha motivado a esforzarme por completar todo lo que tenía a medias y por ello quería darte una mención especial.

Y por último, y en este caso lo más importante, muchas gracias a mis tutores del proyecto, José María y José Manuel, ya que pese a ponérselo difícil por mi indisponibilidad y mis compromisos externos, siempre que les he pedido ayuda no han dudado en echarme una mano y eso dice muchísimo de ellos como tutores, muchas gracias.

## Resumen

El uso de hidrógeno en quemadores gaseosos es un campo de gran interés en el contexto actual de búsqueda de soluciones tecnológicas para la descarbonización. La optimización de su funcionamiento en cuanto a eficiencia y emisiones requiere un conocimiento detallado del flujo de fenómenos complejos como la mezcla aire-combustible y la reacción química en un flujo turbulento. La herramienta más adecuada para ello es la dinámica de fluidos computacional (CFD), que ha conseguido un gran desarrollo en las últimas décadas.

El presente trabajo fin de grado llevará a cabo el modelado mediante CFD del proceso de combustión en un quemador existente en el CMT - Clean Mobility & Thermofluids de la UPV. Dicho sistema ha sido diseñado para funcionar con mezclas duales hidrógeno-metano, produciendo una llama en un flujo con un movimiento de rotación (swirl) de la mezcla aire-combustible. El diseño del quemador permite obtener diferentes grados de rotación, lo cual se traducirá en diferentes características de la llama. El objetivo del modelado es evaluar el proceso de combustión en el quemador, así como su relación con las características de la premezcla de aire-combustible suministrado.

Para ello, se utilizará el software de CFD libre OpenFOAM. Se construirá el modelo del quemador, prestando especial atención a las condiciones de contorno del combustible, así como al mecanismo químico para describir la reacción. Posteriormente, se empleará el software Paraview para el procesamiento y visualización de los resultados obtenidos. Los resultados permitirán evaluar las características esperables en la llama en función de las condiciones de alimentación de la premezcla combustible-aire.



## Resum

L'ús d'hidrogen en cremadors gasosos és un camp de gran interès en el context actual de cerca de solucions tecnològiques per a la descarbonització. L'optimització del seu funcionament quant a eficiència i emissions requereix un coneixement detallat del flux de fenòmens complexos com la mescla aire-combustible i la reacció química en un flux turbulent. L'eina més adequada per a això és la dinàmica de fluids computacional (CFD), que ha aconseguit un gran desenvolupament en les últimes dècades.

El present treball fi de grau durà a terme el modelatge mitjançant CFD del procés de combustió en un cremador existent en el CMT - Clean Mobility & Thermofluids de la UPV. Aquest sistema ha sigut dissenyat per a funcionar amb mescles duals hidrogen-metà, produint una flama en un flux amb un moviment de rotació (swirl) de la mescla aire-combustible. El disseny del cremador permet obtenir diferents graus de rotació, la qual cosa es traduirà en diferents característiques de la flama. L'objectiu del modelatge és avaluar el procés de combustió en el cremador, així com la seua relació amb les característiques de la premescla d'aire-combustible subministrat.

Per a això, s'utilitzarà el programari de CFD lliure OpenFOAM. Es construirà el model del cremador, prestant especial atenció a les condicions de contorn del combustible, així com al mecanisme químic per a descriure la reacció. Posteriorment, s'emprarà el programari Paraview per al processament i visualització dels resultats obtinguts. Els resultats permetran avaluar les característiques esperables en la flama en funció de les condicions d'alimentació de la premescla combustible-aire.



## Abstract

The use of hydrogen in gas burners is a field of great interest in the current context of seeking technological solutions for decarbonization. Optimizing its performance in terms of efficiency and emissions requires a detailed understanding of the complex phenomena such as air-fuel mixture and chemical reaction in a turbulent flow. The most suitable tool for this is Computational Fluid Dynamics (CFD), which has seen significant advancements in recent decades.

This final degree project will model the combustion process in an existing burner at the CMT - Clean Mobility & Thermofluids at UPV using CFD. This system has been designed to operate with hydrogen-methane dual mixtures, producing a flame in a flow with a rotating motion (swirl) of the air-fuel mixture. The burner design allows for different degrees of rotation, resulting in various flame characteristics. The objective of the modeling is to evaluate the combustion process in the burner, as well as its relationship with the characteristics of the supplied air-fuel premix.

For this purpose, the open-source CFD software OpenFOAM will be used. The burner model will be constructed, paying special attention to the fuel boundary conditions and the chemical mechanism to describe the reaction. Subsequently, the software Paraview will be used for processing and visualizing the obtained results. The results will allow for the evaluation of the expected flame characteristics based on the feeding conditions of the air-fuel premix.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>17</b>
1.1. Contexto . . . . .	17
1.2. Objetivos . . . . .	19
1.3. Estructura . . . . .	20
<b>2. Conceptos Previos</b>	<b>21</b>
2.1. Fuentes de Información . . . . .	21
2.2. Mecánica de FLuidos Computacional . . . . .	22
2.2.1. Ecuación de conservación de la masa . . . . .	24
2.2.2. Ecuación de conservación del momento . . . . .	25
2.2.3. Ecuación de conservación de la energía . . . . .	27
2.3. Calor liberado en la combustión . . . . .	29
2.3.1. Entalpía de Reacción . . . . .	29
2.3.2. Importancia del Calor Liberado en la Combustión . . . . .	29
2.3.3. Modelado del Calor Liberado en CFD . . . . .	30
2.4. Modelos de Turbulencia . . . . .	31
2.5. Forma de la Llama . . . . .	34
2.5.1. Lift-Off . . . . .	35
2.5.2. Fluctuaciones de la Llama . . . . .	37
2.6. El Radical Hidroxilo (OH) en una Llama de un Quemador Gaseoso . . . . .	37
2.6.1. Importancia del Radical OH . . . . .	37
2.6.2. Detección y Medición del OH . . . . .	38
2.6.3. Modelado del OH en CFD . . . . .	38
<b>3. Entorno de Trabajo</b>	<b>40</b>
3.1. OpenFOAM . . . . .	40
3.1.1. Estructura de Carpetas y Ficheros en OpenFOAM . . . . .	41
3.2. Paraview . . . . .	45
3.2.1. Características Principales de ParaView . . . . .	45

3.2.2. Utilidad de ParaView en el Estudio de una Llama en una Cámara de Combustión . . . . .	45
<b>4. Caso Base de Partida</b>	<b>47</b>
4.1. Geometría de la Cámara de Combustión . . . . .	47
4.2. Malla de la Cámara de Combustión . . . . .	49
<b>5. Configuración del Caso Transitorio a la Combustión</b>	<b>52</b>
5.1. Condiciones de Operación del Quemador . . . . .	52
5.2. Condiciones de Contorno . . . . .	52
5.2.1. Regiones del Problema . . . . .	53
5.2.2. Velocidad . . . . .	53
5.2.3. Presión . . . . .	55
5.2.4. Temperatura . . . . .	57
5.2.5. Coeficiente de difusividad turbulenta para la transferencia de calor .	58
5.2.6. Condiciones de Contorno para $\epsilon$ , $k$ , y $\nu_t$ . . . . .	60
5.3. Condiciones Iniciales . . . . .	63
5.3.1. Velocidad . . . . .	63
5.3.2. Presión . . . . .	66
5.3.3. Temperatura . . . . .	67
5.3.4. Coeficiente de difusividad turbulenta para la transferencia de calor .	68
5.3.5. Condiciones Iniciales para $\epsilon$ , $k$ , y $\nu_t$ . . . . .	69
5.4. Configuración del Solver . . . . .	72
5.4.1. <code>fvSchemes</code> . . . . .	73
5.4.2. <code>fvSolution</code> . . . . .	75
5.5. Configuración de la Química y la Combustión . . . . .	78
5.5.1. Fichero <code>chemistryProperties</code> . . . . .	78
5.5.2. Fichero <code>combustionProperties</code> . . . . .	81
5.6. Inicialización del transitorio . . . . .	82
5.6.1. Configuración del archivo <code>setFieldsDict</code> . . . . .	85
<b>6. Convergencia a la solución de la simulación</b>	<b>88</b>

6.1. Cambio del Modelo de Combustión: De Laminar a EDC . . . . .	88
6.1.1. Motivación . . . . .	88
6.1.2. Configuración . . . . .	88
6.1.3. Mejora de la Simulación . . . . .	89
6.2. Cambio del Esquema Temporal: De Euler a localEuler . . . . .	89
6.2.1. Motivación . . . . .	89
6.2.2. Configuración . . . . .	89
6.2.3. Mejora de la Simulación . . . . .	89
6.3. Criterios de convergencia . . . . .	89
6.3.1. Residuales . . . . .	89
6.3.2. Variación de flujo másico . . . . .	92
<b>7. Resultados para la condición de operación nominal</b>	<b>95</b>
7.1. Comparación Esquemas de primer y segundo orden . . . . .	95
7.1.1. Metodología . . . . .	95
7.1.2. Resultados . . . . .	96
7.1.3. Conclusión . . . . .	99
7.2. Aspectos Clave de la Simulación CFD del Quemador . . . . .	99
<b>8. Resultados para cambios en el Reparto de Aire en la Entrada</b>	<b>105</b>
8.1. Objetivo del Estudio . . . . .	105
8.2. Metodología . . . . .	105
8.3. Condiciones Iniciales del caso AR = 15 % . . . . .	105
8.4. Convergencia . . . . .	106
8.4.1. Datos de Simulación . . . . .	106
8.4.2. Análisis de Convergencia . . . . .	107
8.4.3. Conclusión . . . . .	107
8.5. Estudio Comparativo entre AR 10 % y AR 15 % . . . . .	107
8.5.1. Distribución de Temperatura . . . . .	107
8.5.2. Fracciones Mássicas de Especies . . . . .	108
8.5.3. Campo de Velocidad . . . . .	112

8.5.4. Potencia del Quemador y Forma de la Llama . . . . .	113
<b>9. Verificación de la Simulación</b>	<b>115</b>
9.1. Metodología . . . . .	115
<b>10. Conclusión</b>	<b>119</b>
<b>11. Plano</b>	<b>123</b>
<b>12. Pliego de Condiciones</b>	<b>126</b>
12.1. Normativa UPV . . . . .	126
12.1.1. Capítulo I. Disposiciones Generales . . . . .	126
12.1.2. Capítulo II. Tutores y tribunales de calificación . . . . .	126
12.2. Reales decretos . . . . .	127
12.2.1. RD 822/2021 . . . . .	127
12.2.2. RD 488/1997 . . . . .	127
12.2.3. RD-ley 10/2021 . . . . .	127
<b>13. Presupuesto</b>	<b>129</b>
13.1. Cálculo de los costes unitarios . . . . .	129
13.1.1. Activos físicos . . . . .	129
13.1.2. Softwares . . . . .	130
13.2. Lugar de trabajo . . . . .	130
13.2.1. Coste del personal . . . . .	130
13.3. Presupuesto total . . . . .	131
<b>14. Bibliografía</b>	<b>133</b>



## Índice de figuras

1.	Fracción molar de dióxido de carbono (ppm) a lo largo de los años en el Observatorio de Mauna Loa. . . . .	17
2.	Geometría preliminar del quemador de gas experimental proporcionada por el departamento CMT - Motores Térmicos. . . . .	47
3.	Croquis de la sección del quemador de gas donde se aprecia la entrada de cada una de las especies. . . . .	48
4.	Esquema de la división de etapas de la malla. . . . .	49
5.	Estado del campo de velocidades antes de iniciar la combustión. . . . .	83
6.	Estado del campo de fracciones de CH <sub>4</sub> antes de iniciar la combustión. . . . .	84
7.	Estado del campo de dosado relativo antes de iniciar la combustión. . . . .	85
8.	Estado del campo de temperatura antes de iniciar la combustión. . . . .	87
9.	Evolución de la diferencia de gasto másico hasta la convergencia en las últimas iteraciones de la simulación. . . . .	93
10.	Comparación de la distribución de temperatura: Arriba (a) Esquema de segundo orden con $\gamma = 0,5$ , Abajo (b) Esquema de primer orden <i>upwind</i> . . . . .	96
11.	Comparación de la concentración de OH: Arriba (a) Esquema de segundo orden con $\gamma = 0,5$ , Abajo (b) Esquema de primer orden <i>upwind</i> . . . . .	97
12.	Comparación del valor de $\dot{Q}$ : Arriba (a) Esquema de segundo orden con $\gamma = 0,5$ , Abajo (b) Esquema de primer orden <i>upwind</i> . . . . .	98
13.	Distribución del campo de temperatura. . . . .	100
14.	Fracción másica de CH <sub>4</sub> y O <sub>2</sub> . . . . .	101
15.	Fracción másica de CO. . . . .	102
16.	Campo de velocidad. . . . .	102
17.	Campo de la tasa de liberación de energía $\dot{Q}$ [ $W/m^3$ ]. . . . .	103
18.	Campo de temperatura de la solución con AR = 10 % (a) y AR = 15 % (b) [K]. . . . .	108
19.	Fracciones másicas de CH <sub>4</sub> de la solución con AR = 10 % Arriba (a) y AR = 15 % Abajo (b) [-]. . . . .	109
20.	Fracciones másicas de O <sub>2</sub> de la solución con AR = 10 % Arriba (a) y AR = 15 % Abajo (b) [-]. . . . .	110
21.	Fracciones másicas de CO de la solución con AR = 10 % Arriba (a) y AR = 15 % Abajo (b) [-]. . . . .	111
22.	Campo de velocidades de la solución con AR = 10 % Arriba (a) y AR = 15 % Abajo (b) [m/s]. . . . .	112

23.	Calor liberado en la solución con AR = 10 % Arriba (a) y AR = 15 % Abajo (b) [W/m <sup>3</sup> ]. . . . .	113
24.	Visualización de quimioluminiscencia del OH* del quemador experimental. .	116
25.	Promedio del $\dot{Q}$ en toda la profundidad de la simulación. . . . .	117



## Índice de tablas

1.	Dimensiones del quemador de gas. . . . .	49
2.	Tamaño de celdas en cada una de las regiones predefinidas. . . . .	51
3.	Valores de la altura de las primeras celdas de la capa límite. . . . .	51
4.	Valores más relevantes de la comprobación de la calidad de malla para el caso base. . . . .	51
5.	Datos de funcionamiento del quemador. . . . .	52
6.	Valor del flujo másico de aire para caso AP = 10%. . . . .	63
7.	Valor del flujo másico de combustible para el caso AP = 10%. . . . .	64
8.	Valor del flujo másico total para caso AP = 10%. . . . .	64
9.	Tabla de Residuales y Número de Iteraciones para Diferentes Variables . . .	91
10.	Valor del flujo másico de aire para caso AP = 10%. . . . .	93
11.	Valor de la potencia del quemador en función del esquema utilizado. . . . .	99
12.	Valor de la potencia del quemador. . . . .	103
13.	Valores de gasto másico de aire para caso AP = 15%. . . . .	105
14.	Tabla de Residuales y Número de Iteraciones para Diferentes Variables . . .	106
15.	Valor de la potencia de quemador de la solución con AR = 10% Arriba (a) y AR = 15% Abajo (b) [W]. . . . .	114
16.	Resumen general del presupuesto . . . . .	131

MEMORIA

## 1. Introducción

En esta sección se desarrolla una introducción al trabajo y principales objetivos que se pretenden lograr con el estudio del modelado del proceso de combustión que sucede en un quemador existente en el CMT - Clean Mobility & Thermofluids. Dichas simulaciones realizadas y configuradas desde cero en el software de código abierto OpenFOAM.

### 1.1. Contexto

En los últimos años, ha crecido el interés por estudiar y desarrollar tecnologías más eficientes y amigables con el medio ambiente para la generación de energía y el transporte. La necesidad de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y promover una transición hacia fuentes de energía más limpias ha impulsado la búsqueda de diferentes soluciones en el campo de la combustión. La Administración Nacional Oceánica y Atmosférica (NOAA) monitorea y estudia los niveles de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) en la atmósfera (8). Desde el observatorio de Mauna Loa (Hawái), se ha medido a lo largo de los años la concentración de  $\text{CO}_2$  en la atmósfera, obteniendo las Figuras 1. La línea roja representa los valores medios mensuales, mientras que la línea negra muestra los mismos valores ajustados por ciclo estacional. Analizando las tendencias, se observa un claro aumento de la concentración de dióxido de carbono a lo largo de los años, pasando de una media de 420.23 ppm en abril de 2022 a 423.28 ppm en abril de 2023.

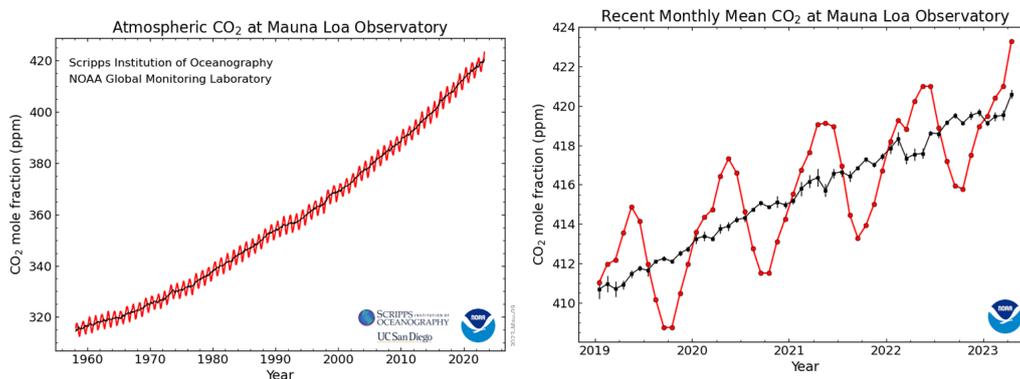


Figura 1: Fracción molar de dióxido de carbono (ppm) a lo largo de los años en el Observatorio de Mauna Loa.

Es por ello que la combustión de hidrógeno ha vuelto a ganar interés en la industria aeronáutica debido a su potencial de descarbonización, ya que la generación de gases de efecto invernadero se reduce a cero en el proceso de combustión. A partir de un quemador de hidrógeno existente en el departamento CMT - Clean Mobility & Thermofluids, surge la necesidad de obtener resultados computacionales que permitan compararlos con los reales.

El diseño del quemador permite obtener diferentes grados de rotación, lo que se traduce en diversas características del flujo a la entrada de la cámara de combustión y, por ende, de la llama. En este contexto, se realizan simulaciones CFD sobre el comportamiento e interacción del fluido en un quemador de gas con diferentes entradas de flujo másico. La rotación del fluido en un quemador de gas juega un papel fundamental en la distribución de la energía térmica y la mezcla de los diferentes componentes en la cámara de combustión.

Una rotación adecuada del fluido puede mejorar significativamente la eficiencia de la combustión y reducir las emisiones contaminantes. Por lo tanto, entender cómo la variación del flujo másico de entrada de aire, aire con metano e hidrógeno gaseoso afecta la rotación del fluido en el quemador es vital para optimizar el diseño y rendimiento de estos dispositivos.

Además, el estudio de la combinación de aire con metano e hidrógeno gaseoso en la mezcla de combustible tiene un gran interés actual debido al creciente enfoque en el uso del hidrógeno como vector energético y su potencial para la descarbonización de diferentes sectores, como el transporte y la generación de electricidad. El metano, por su parte, es uno de los componentes principales del gas natural y también se considera una fuente de energía más limpia en comparación con los combustibles fósiles convencionales.

Por tanto, este trabajo se enmarca en un contexto actual de búsqueda de soluciones más eficientes y sostenibles en el campo del transporte. Los resultados obtenidos en este estudio contribuirán al conocimiento científico y tecnológico en el diseño y optimización de quemadores de gas, que son una pieza clave en la transición hacia un sistema más limpio y sostenible. Además, se pretende establecer las bases que sirvan para futuros proyectos donde se pueda añadir hidrógeno a la mezcla para completar el modelo de combustión que se pretende obtener.

## 1.2. Objetivos

El objetivo principal del trabajo es determinar un modelo de CFD con el que poder estudiar distintos casos de combustión en el quemador similar al real que se encuentra en las instalaciones del CMT, permitiendo variar las condiciones de entrada tanto del flujo de aire como del flujo de premezcla. A su vez, existen objetivos secundarios que permitirán obtener un resultado final optimizado:

- Obtención de la configuración de Solvers óptimos para el caso de combustión que se está estudiando, de forma que se encuentre el equilibrio entre un resultado preciso y un coste computacional que no sea demasiado elevado.
- Comparación de dos casos distintos de combustión variando las condiciones tanto del flujo de aire de entrada como del flujo de premezcla de entrada. Esto permite empezar a hacer observaciones tanto del comportamiento del modelo CFD, para observar su estabilidad, como de la influencia de los cambios en las condiciones de entrada.
- Validación de los resultados obtenidos mediante el modelo CFD obtenido con OpenFOAM relacionándolo con el quemador real. Comparando la forma de la llama en cada caso mediante datos del quemador experimental y de la solución simulada.
- Obtener un modelo que no presente problemas debido a la gran cantidad de celdas de la malla a utilizar.
- Obtener la convergencia en todos los casos a estudiar.
- Estudiar que parámetros o condiciones hacen más difícil la convergencia para centrar los esfuerzos de cálculo en esos puntos.
- Hacer uso exclusivo de software de uso libre para abaratar costes de simulación.
- Obtener un proceso de encendido de llama en una simulación CFD que busque un compromiso entre coste computacional y precisión.

### 1.3. Estructura

Este trabajo se encuentra estructurado en 4 partes: memoria, planos, pliegos de condiciones y presupuesto. La mayor parte del documento se encuentra en la memoria del trabajo, que abarca 6 capítulos diferentes.

El primer capítulo abarca la introducción, donde se intenta transmitir al lector una idea aproximada de lo que se pretende lograr con la investigación y a su vez situar todo el trabajo en un contexto que haga más fácil la comprensión de sus objetivos.

El segundo capítulo describe los fundamentos teóricos en que se basa todo lo relacionado con la investigación y que son necesarios para comprender los cambios y modificaciones realizados en el programa CFD OpenFOAM y en las variables de entrada a la cámara.

Posteriormente, en el capítulo tres se describe el entorno de trabajo sobre el que se realiza este trabajo, abarcando desde las cuestiones más básicas de OpenFOAM que son importantes para el estudio, hasta las herramientas de post-procesamiento utilizadas en Paraview para examinar los resultados.

Puesto que este trabajo se basa en un caso base que se ha obtenido en otro TFG del mismo quemador, en el cuarto capítulo se hace un breve desarrollo de las principales características que han llevado a la configuración final de la malla y la geometría a través de un estudio paramétrico y un profundo estudio de los resultados del mismo.

Los capítulos cinco y seis son los que tienen mayor relevancia para el estudio, pues en ellos se define el proceso mediante el cual se ha logrado alcanzar el modelo final mediante cambios de funcionamiento del programa CFD, distintos métodos de inicialización, comparación de Solvers y condiciones. Y por último una vez obtenido el modelo, un breve estudio de los resultados de un par de estados distintos de funcionamiento del quemador, donde se puede comprobar la eficacia del modelo CFD.

## 2. Conceptos Previos

El capítulo de conceptos previos es una parte esencial en el desarrollo de este trabajo, ya que proporciona los conocimientos y conceptos necesarios para comprender y abordar el estudio del quemador de gas. En este capítulo se presentarán y explicarán los principios teóricos y fundamentos científicos relevantes que respaldan la investigación y el análisis realizados en el proyecto. Se abordarán temas como la mecánica de fluidos, velocidad de combustión laminar, formación de reactivos como OH, entre otros. A través de esta sección, se establecerá una base sólida de conocimiento que permitirá una comprensión profunda de los fenómenos y procesos involucrados en el quemador de gas, y servirá como referencia teórica clave para el análisis y la interpretación de los resultados obtenidos en la simulación y estudio del sistema.

### 2.1. Fuentes de Información

La revisión bibliográfica es esencial al realizar un proyecto. En esta sección se lleva a cabo una búsqueda de recursos para recopilar y revisar la información científico-técnica más relevante y actualizada relacionada con el tema del estudio. A lo largo del apartado, se detallan las principales fuentes consultadas para desarrollar el presente trabajo. Sin embargo, en la bibliografía del documento se pueden encontrar con más detalle.

En primer lugar, es necesario un contexto sobre los procesos de mecánica de fluidos computacional para comprender lo que ocurre en la simulación CFD. Por ello, el trabajo de fin de grado se ha apoyado principalmente en "Computational Fluid Dynamics: The Basics With Applications" de John D. Anderson (1) y "Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method" de H.K. Versteeg y W. Malalasekera (16) para entender las bases de los fenómenos que rigen el problema.

Para aprender el funcionamiento de OpenFOAM es necesario recurrir a "OpenFOAM User Guide" (10) y "CFD Direct" (2). Además, los propios tutoriales disponibles al descargar el software también son útiles para utilizar las diferentes herramientas disponibles. Una vez avanzado en la configuración del caso, surgen problemas específicos que son difíciles de solucionar con guías de usuario, por lo que se recurre a "CFD Online Wiki" (3), donde muchos problemas ya han sido resueltos por otros usuarios de OpenFOAM en el pasado.

En cuanto a la información necesaria para llevar a cabo un correcto modelado de la combustión, se ha acudido a ejemplos de estudios oficiales como el "Sandia D Flame" de Majid Mansouri Borujeni y Hamid Reza Norouzi y el "ESTUDIO EXPERIMENTAL Y MODELADO CFD DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN DE MEZCLAS COMBUSTIBLES DE HIDRÓGENO, METANO Y GAS DE SÍNTESIS EN UNA BOMBA CILÍNDRICA CON ACCESO ÓPTICO" de Alexandra Lisbeth Camaño Camaño.

Debido a la escasa información disponible en la web sobre el software OpenFOAM y a que la configuración de cada caso es muy diferente, la mayoría de la información necesaria para configurar el estudio ha sido aportada mediante la experiencia de los profesores del departamento o mediante prueba y error hasta encontrar un método eficaz para el caso de estudio.

Por último, una vez obtenidos los resultados del caso, se van a emplear los datos experimentales del departamento CMT - Clean Mobility & Thermofluids para validar las

tendencias.

## 2.2. Mecánica de Fluidos Computacional

En la década de los 60, la mecánica de fluidos operaba bajo lo que se denominaba el "Mundo de las dos aproximaciones", que comprendía la teoría y la experimentación. El desarrollo de los ordenadores digitales de alta velocidad, combinado con la precisión de los algoritmos numéricos, revolucionó la forma en que se estudia la mecánica de fluidos, dando lugar a una tercera aproximación: la mecánica de fluidos computacional. Hoy en día esta aproximación es parte integral de la solución, junto a la experimentación pura y la teoría.

La mecánica de fluidos computacional (CFD) permite analizar la interacción fluido-sólido mediante simulaciones numéricas basadas en los principios básicos de conservación de masa, momento y energía. Las ecuaciones fundamentales del fluido representan matemáticamente las leyes de conservación de la física: el gasto másico se conserva, la variación de momento equivale al sumatorio de fuerzas del fluido (segunda ley de Newton) y la variación de energía corresponde al sumatorio del calor añadido y del trabajo realizado (primera ley de la termodinámica).

Para comprender el trabajo realizado por el software, la mecánica de fluidos computacional opera mediante la división del volumen de control en pequeñas partes denominadas celdas que, en su conjunto, forman una malla. Las ecuaciones que describen el comportamiento del fluido (ecuaciones fundamentales) se resuelven para cada una de estas celdas mediante técnicas numéricas o métodos de solución directa hasta conseguir la solución deseada. Por ello, es necesario una breve explicación previa sobre las ecuaciones que rigen el comportamiento del sistema antes de realizar el estudio.

El proceso de la mecánica de fluidos computacional (CFD) puede dividirse en tres bloques principales: pre-proceso, solver y post-proceso.

### Pre-proceso

En el pre-proceso, el usuario introduce todos los datos y parámetros necesarios para establecer las bases y la definición del problema. Primero, se define el dominio del estudio: la geometría. Dado que esta es una región muy amplia, es necesario discretizarla en partes más pequeñas denominadas celdas, como se mencionó anteriormente. El tamaño de las celdas es crucial para obtener resultados fiables y válidos. Además, es habitual establecer diferentes regiones dentro del volumen de control para discretizar con mayor precisión las zonas de interés en el estudio.

Tras realizar el mallado, se seleccionan los fenómenos físicos que deben ser modelados y se definen las propiedades del fluido. Finalmente, es necesario establecer las condiciones de contorno para las celdas que coinciden con las paredes del dominio y las condiciones iniciales desde las cuales partir para resolver las ecuaciones fundamentales.

El proceso de mallado es uno de los más importantes para realizar una simulación correcta del caso CFD, donde la resolución del problema de fluidos se define en los nodos de cada una de las celdas. La precisión está gobernada principalmente por el número de celdas en la malla. En general, un mayor número de celdas equivale a una mayor precisión. No obstante, a medida que este número aumenta, también lo hace el coste computacional, lo que implica un mayor tiempo de cálculo y la necesidad de un hardware más potente. Las mallas óptimas normalmente no son uniformes, es decir, existen áreas más refinadas

donde las variaciones son mayores y áreas más gruesas donde las variaciones del estudio no son tan importantes. Algunos programas CFD auto-refinan la zona de la malla donde estas variaciones son grandes para obtener una mayor precisión; sin embargo, OpenFOAM no es uno de estos programas. Como curiosidad, se estima que alrededor del 50% del tiempo invertido en la industria del CFD corresponde a la definición de la geometría y de la malla.

### **Solver**

En el proceso del solver, se pueden emplear diferentes técnicas: diferencias finitas, elementos finitos y métodos espectrales. La técnica más comúnmente utilizada es conocida como el Método de los Volúmenes Finitos, en la que el código numérico sigue los siguientes pasos:

Integración de las ecuaciones fundamentales del fluido a lo largo de todo el volumen de control: En este paso, se expresa la conservación exacta de todas las propiedades relevantes para cada tamaño finito de celda.

Discretización de todas las ecuaciones resultantes en un sistema algebraico: Los propios códigos CFD contienen técnicas de discretización adecuadas para los fenómenos de transporte, convección y difusión, así como para los términos fuente.

Solución de las ecuaciones algebraicas por un método iterativo: Los fenómenos físicos subyacentes son complejos y no lineales, por lo que es habitual emplear métodos iterativos para obtener una solución aproximada. Las soluciones más comunes en el contexto de OpenFOAM son:

Algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations): Diseñado para flujo estacionario, este algoritmo garantiza una buena relación entre la presión y la velocidad. Algoritmo PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators): Diseñado para flujos transitorios, este mecanismo realiza múltiples correcciones de presión y velocidad dentro de cada paso de tiempo, lo que mejora la precisión y la estabilidad temporal. Algoritmo PIMPLE (Pressure-Implicit with Splitting of Operators and Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations): Combina las iteraciones de corrección de presión y velocidad del método SIMPLE con las correcciones adicionales del método PISO, mejorando la estabilidad y permitiendo mayores tamaños de paso de tiempo.

El solver utilizado en este trabajo es el denominado en el contexto de OpenFOAM como reactingFOAM", el cual utiliza el algoritmo PIMPLE para proporcionar una solución robusta y eficiente para simulaciones de flujos reactivos, aprovechando las ventajas de la combinación de los métodos SIMPLE y PISO.

Además, en la actualidad, también es común emplear técnicas como:

Gauss-Seidel con aceleradores multimalla. Métodos de gradientes conjugados. Estas técnicas y métodos permiten resolver las ecuaciones algebraicas que representan los fenómenos de transporte de masa, momento y energía dentro del dominio del fluido, asegurando que las propiedades físicas se conservan y que las interacciones fluido-sólido se modelan adecuadamente.

### **Post-Proceso**

En último lugar, el post-proceso consiste en las herramientas de visualización empleadas para representar los resultados obtenidos en el caso CFD. Algunas de las utilidades que se pueden emplear incluyen:

Visualización de la geometría y de la malla. Gráficas de vectores. Gráficos de contornos.

Gráficos de superficies 2D y 3D. Seguimiento de partículas. Manipulación de la vista: traslación, rotación, escalado. Evolución temporal. En este caso en particular, se ha empleado el software ParaView, que permite un manejo intuitivo y una fácil exportación de datos. Además, el post-proceso facilita la visualización clara de los resultados del caso CFD, lo que ayuda a su comprensión por personas no especializadas en este campo.

El post-proceso también incluye la validación y comprobación de que el cálculo CFD ha sido realizado de manera adecuada para obtener resultados fiables. Los pasos a seguir para asegurar esto incluyen:

Definir la geometría, la malla y todos los parámetros necesarios para la resolución. Realizar la resolución hasta alcanzar la convergencia. Analizar la independencia de malla: Verificar que los resultados no cambian significativamente con diferentes tamaños de malla. Validar la solución: Comparar los resultados con datos experimentales o teóricos. Definir y ejecutar el post-proceso: Exponer todos los resultados visualmente.

### 2.2.1. Ecuación de conservación de la masa

La ecuación de conservación de la masa es un principio fundamental en la dinámica de fluidos y se aplica tanto a flujos incompresibles como compresibles. Este principio establece que la masa de un sistema cerrado debe permanecer constante en el tiempo. En el contexto de la dinámica de fluidos computacional (CFD), esta ecuación se utiliza para describir cómo la densidad de un fluido cambia en el espacio y en el tiempo.

#### Ecuación de Continuidad

La ecuación de conservación de la masa también se conoce como la ecuación de continuidad. En forma diferencial, esta ecuación se expresa como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.1)$$

donde:

- $\rho$  es la densidad del fluido.
- $t$  es el tiempo.
- $\mathbf{u}$  es el vector de velocidad del fluido.
- $\nabla \cdot$  es el operador divergencia.

Esta ecuación indica que el cambio temporal de la densidad en un punto dado más la divergencia del flujo de masa en ese punto debe ser igual a cero.

#### Interpretación Física

La ecuación de continuidad puede interpretarse de la siguiente manera:

- El término  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  representa el cambio local en la densidad con respecto al tiempo.

- El término  $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$  representa la divergencia del flujo de masa, es decir, la tasa neta a la que la masa está entrando o saliendo de un volumen de control.

La suma de estos dos términos igual a cero asegura que cualquier cambio en la masa dentro de un volumen de control es exactamente compensado por el flujo de masa a través de las fronteras del volumen.

### Flujos Compresibles

Para flujos compresibles, donde la densidad puede variar, la ecuación de continuidad completa (2.1) debe ser utilizada. Esto es común en situaciones donde las variaciones de presión y temperatura son significativas, tales como en un proceso de combustión.

### Forma Integral

La ecuación de conservación de la masa también puede expresarse en forma integral. Para un volumen de control fijo  $V$  con superficie de control  $S$ , la forma integral de la ecuación de continuidad es:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (2.2)$$

donde  $d\mathbf{A}$  es un vector diferencial de área en la superficie de control  $S$ . La primera integral representa la tasa de cambio de la masa dentro del volumen de control, y la segunda integral representa el flujo neto de masa a través de la superficie de control.

### 2.2.2. Ecuación de conservación del momento

Esta ecuación, también conocida como las ecuaciones de Navier-Stokes, describe el movimiento de un fluido bajo la influencia de fuerzas externas e internas. En el contexto de la dinámica de fluidos computacional (CFD), la ecuación de conservación del momento es crucial para predecir cómo se comporta un fluido en diferentes condiciones y geometrías.

### Forma general

La forma general de la ecuación de conservación del momento en un fluido es:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \mathbf{g} \quad (2.3)$$

donde:

- $\rho$  es la densidad del fluido.
- $\mathbf{u}$  es el vector de velocidad del fluido.
- $t$  es el tiempo.
- $p$  es la presión del fluido.
- $\tau$  es el tensor de esfuerzos viscosos.

- $\mathbf{g}$  es el vector de aceleración debido a la gravedad (u otras fuerzas externas).

### Desglose de los Términos

- Término de Inercia

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} \quad (2.4)$$

Este término representa el cambio temporal del momento por unidad de volumen en el fluido. Describe cómo la cantidad de movimiento del fluido cambia con el tiempo en un punto dado.

- Término de Convección

$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) \quad (2.5)$$

Este término, conocido como término convectivo, representa el transporte de momento debido al movimiento del fluido. Es un término no lineal que describe cómo el momento se transfiere a través del flujo de masa del fluido.

- Término de Presión

$$-\nabla p \quad (2.6)$$

Este término describe la fuerza debida a las diferencias de presión dentro del fluido. La presión actúa como una fuerza que impulsa el fluido desde regiones de alta presión hacia regiones de baja presión.

- Término Viscoso

$$\nabla \cdot \tau \quad (2.7)$$

Este término representa las fuerzas internas debidas a la viscosidad del fluido. El tensor de esfuerzos viscosos  $\tau$  está relacionado con las tasas de deformación del fluido y las propiedades viscosas del mismo. Para un fluido newtoniano, el tensor de esfuerzos viscosos se puede expresar como:

$$\tau = \mu \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \quad (2.8)$$

donde:

- $\mu$  es la viscosidad dinámica del fluido.
  - $\mathbf{I}$  es el tensor identidad.
- Fuerzas Externas

$$\rho\mathbf{g} \quad (2.9)$$

Este término representa las fuerzas externas que actúan sobre el fluido, como la gravedad. Estas fuerzas pueden variar dependiendo del problema específico que se esté estudiando.

### Forma Integral

La ecuación de conservación del momento también puede expresarse en forma integral para un volumen de control fijo  $V$  con superficie de control  $S$ :

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV + \int_S \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot d\mathbf{A}) = - \int_V \nabla p dV + \int_S \boldsymbol{\tau} \cdot d\mathbf{A} + \int_V \rho \mathbf{g} dV \quad (2.10)$$

donde  $d\mathbf{A}$  es un vector diferencial de área en la superficie de control  $S$ .

### 2.2.3. Ecuación de conservación de la energía

Esta ecuación describe cómo la energía dentro de un sistema fluido cambia debido a la transferencia de calor, el trabajo realizado por fuerzas externas y el trabajo realizado por la presión. En el contexto de la dinámica de fluidos computacional (CFD), la ecuación de conservación de la energía es crucial para predecir la distribución de temperatura y el comportamiento energético del fluido.

**Forma General** La forma general de la ecuación de conservación de la energía en un fluido es:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} + \dot{q}_{\text{chem}} \quad (2.11)$$

donde:

- $\rho$  es la densidad del fluido.
- $e$  es la energía interna total por unidad de masa, que incluye la energía interna  $u$ , la energía cinética  $\frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2$ , y la energía potencial  $gz$ :  $e = u + \frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2 + gz$ .
- $\mathbf{u}$  es el vector de velocidad del fluido.
- $\mathbf{q}$  es el vector de flujo de calor, que puede incluir conducción térmica y otros mecanismos de transferencia de calor.
- $\boldsymbol{\tau}$  es el tensor de esfuerzos viscosos.
- $\mathbf{g}$  es el vector de aceleración debido a la gravedad.
- $\dot{q}_{\text{chem}}$  es la tasa de generación de energía por reacciones químicas por unidad de volumen.

### Desglose de los Términos

- Término de Energía

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} \quad (2.12)$$

Este término representa el cambio temporal de la energía por unidad de volumen en el fluido. Describe cómo la cantidad de energía del fluido cambia con el tiempo en un punto dado.

- Término de Convección

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{e} \mathbf{u}) \quad (2.13)$$

Este término, conocido como término convectivo, representa el transporte de energía debido al movimiento del fluido. Describe cómo la energía se transfiere a través del flujo de masa del fluido.

- Flujo de Calor

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} \quad (2.14)$$

Este término describe la transferencia de calor dentro del fluido. El vector de flujo de calor  $\mathbf{q}$  generalmente se describe mediante la ley de Fourier para la conducción de calor:

$$\mathbf{q} = -k \nabla T \quad (2.15)$$

donde  $k$  es la conductividad térmica del fluido y  $T$  es la temperatura.

- Disipación Viscosa

$$\Phi \quad (2.16)$$

Este término representa la tasa de disipación viscosa, que es la conversión de la energía mecánica en calor debido a la viscosidad del fluido. Para un fluido newtoniano, se puede expresar como:

$$\Phi = \tau : \nabla \mathbf{u} \quad (2.17)$$

donde  $\tau$  es el tensor de esfuerzos viscosos y  $:$  denota el producto doble tensorial.

- Fuerzas Externas

$$\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} \quad (2.18)$$

Este término representa el trabajo realizado por las fuerzas externas, como la gravedad, sobre el fluido. Estas fuerzas pueden variar dependiendo del problema específico que se esté estudiando.

- Reacciones Químicas

$$\dot{q}_{\text{chem}} \quad (2.19)$$

Este término es crucial en la combustión y representa la energía liberada o absorbida por reacciones químicas dentro del volumen de control.

### Forma Integral

La ecuación de conservación de la energía también puede expresarse en forma integral para un volumen de control fijo  $V$  con superficie de control  $S$ :

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e \, dV + \int_S \rho e (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \, dS = - \int_S \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_V \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) \, dV + \int_V \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} \, dV + \int_V \dot{q}_{\text{chem}} \, dV \quad (2.20)$$

donde  $d\mathbf{A}$  es un vector diferencial de área en la superficie de control  $S$ .

### Aplicación en CFD

En CFD, la ecuación de conservación de la energía se resuelve junto con las ecuaciones de continuidad y de conservación del momento para obtener una descripción completa del flujo del fluido. Estas ecuaciones se discretizan y resuelven numéricamente utilizando diversos métodos, como los métodos de volúmenes finitos, elementos finitos o diferencias finitas.

## 2.3. Calor liberado en la combustión

El calor liberado en la reacción es un aspecto fundamental en el estudio de la combustión, especialmente en el contexto de la dinámica de fluidos computacional (CFD) aplicada a llamas en quemadores gaseosos. Este calor es producto de las reacciones químicas que ocurren durante la combustión y proporciona información esencial sobre la eficiencia del proceso, la temperatura de la llama y la distribución de la energía dentro del sistema de combustión. Comprender y modelar adecuadamente el calor liberado es crucial para el diseño y optimización de quemadores y sistemas de combustión.

El calor liberado en una reacción de combustión es la cantidad de energía térmica producida cuando un combustible reacciona con un oxidante. Este calor se libera debido a la ruptura de enlaces químicos en los reactivos y la formación de nuevos enlaces en los productos de combustión. La cantidad de calor liberado puede cuantificarse mediante la entalpía de reacción ( $\Delta H_r$ ).

### 2.3.1. Entalpía de Reacción

La entalpía de reacción es una medida del cambio de energía durante una reacción química a presión constante. Para una reacción general de combustión, se puede escribir como:

$$\Delta H_r = \sum(\Delta H_f^\circ \text{productos}) - \sum(\Delta H_f^\circ \text{reactivos}) \quad (2.21)$$

donde  $\Delta H_f^\circ$  es la entalpía de formación estándar de cada especie involucrada en la reacción. El valor de  $\Delta H_r$  es negativo para reacciones exotérmicas, indicando que se libera calor.

### 2.3.2. Importancia del Calor Liberado en la Combustión

El calor liberado en la combustión afecta diversos aspectos del proceso de combustión y proporciona información crucial para el análisis y diseño de sistemas de combustión.

- Temperatura de la Llama

El calor liberado determina la temperatura de la llama. Una mayor liberación de calor resulta en temperaturas de llama más altas, lo que puede mejorar la eficiencia de la

combustión pero también puede generar desafíos como el aumento de las emisiones de NO<sub>x</sub>.

- **Distribución de la Energía**

La distribución del calor liberado dentro del quemador afecta la transferencia de calor a las superficies circundantes y puede influir en la estabilidad de la llama. Un calor liberado uniforme contribuye a una llama estable, mientras que una distribución no uniforme puede causar fluctuaciones y posibles apagones.

- **Validación de Modelos**

En CFD, la predicción precisa del calor liberado es esencial para la validación de los modelos de combustión. Comparar la cantidad de calor liberado predicha con datos experimentales ayuda a ajustar los modelos y mejorar su precisión.

### **2.3.3. Modelado del Calor Liberado en CFD**

El modelado del calor liberado en CFD implica la incorporación de mecanismos cinéticos detallados y la solución de las ecuaciones de energía y especies químicas.

- **Mecanismos Cinéticos**

Para modelar adecuadamente el calor liberado, es necesario utilizar mecanismos cinéticos detallados que describan las reacciones químicas involucradas en la combustión. Estos mecanismos incluyen reacciones elementales con sus respectivas tasas de reacción y datos termodinámicos.

- **Ecuaciones de Energía y Especies**

En CFD, las ecuaciones de energía y especies químicas se resuelven para obtener la distribución de temperatura y la concentración de especies en el dominio de simulación. La ecuación de energía tiene en cuenta el calor liberado por las reacciones químicas.

- **Interacción con Turbulencia**

En flujos turbulentos, la interacción entre la turbulencia y la combustión afecta la distribución del calor liberado. Modelos como LES (Large Eddy Simulation) y RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) con acoplamiento a modelos de combustión pueden capturar estas interacciones de manera más precisa.

El calor liberado en la reacción es un parámetro fundamental en la combustión que afecta la temperatura de la llama, la distribución de la energía y la estabilidad de la combustión. En CFD, modelar adecuadamente el calor liberado es crucial para la simulación y validación de llamas en quemadores gaseosos. A través de mecanismos cinéticos detallados, la solución de las ecuaciones de energía y especies, y la consideración de la interacción con la turbulencia, es posible obtener predicciones precisas y útiles para el diseño y optimización de procesos de combustión.

## 2.4. Modelos de Turbulencia

La turbulencia es un fenómeno que afecta a un fluido cuando su velocidad es lo suficientemente alta, generando un movimiento caótico en forma de torbellinos o vórtices no estacionarios (15) y de todo orden de tamaños en función de la energía que disipan (4). Cuando un fluido se ve afectado por la turbulencia, el efecto es tan significativo que no se debe despreciar, ya que todos los términos de Navier-Stokes son de orden similar. Sin embargo, al no presentar ninguna solución analítica conocida, se debe modelar su comportamiento.

Por ello existen numerosos modelos de turbulencia que nos ayudan a resolver este problema para poder resolver las ecuaciones mediante métodos numéricos.

### Reynolds Averaged Navier Stokes RANS"

El modelo de turbulencia RANS se basa en la descomposición de cada variable en su promedio y sus fluctuaciones en el tiempo, lo cual añade a las ecuaciones de Navier-Stokes una nueva variable. Para resolver este problema es necesario tomar una nueva hipótesis que permita cubrir la adición de esta nueva variable al esquema. En función de la hipótesis que tomemos, variará el coste computacional del problema a la vez que la precisión de la solución, es por eso que no existe una solución única y es necesario valorar cada una de ellas en base al problema.

#### ■ Hipótesis de Viscosidad Turbulenta:

La turbulencia se puede tratar como una viscosidad turbulenta, que se relaciona directamente proporcional a una propiedad característica del fluido multiplicada por una constante de proporcionalidad, denominado coeficiente de viscosidad turbulenta.

Existen varios modelos que siguen esta hipótesis, los más empleados son los que utilizan la energía cinética turbulenta "k" o la disipación turbulenta "ε" o "ω".

#### k-epsilon:

El modelo  $k-\epsilon$  es uno de los modelos de turbulencia más utilizados en la mecánica de fluidos computacional. Este modelo es especialmente popular debido a su simplicidad y capacidad para ofrecer resultados precisos en una variedad de flujos turbulentos.

Es un modelo de dos ecuaciones que utiliza dos variables para describir la turbulencia:

- $k$ : la energía cinética turbulenta.
- $\epsilon$ : la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

El modelo  $k-\epsilon$  está compuesto por dos ecuaciones de transporte (6) adicionales a las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo:

#### 1. Ecuación para $k$ (energía cinética turbulenta):

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \epsilon \quad (2.22)$$

Donde:

- $k$  es la energía cinética turbulenta.
- $U_j$  son las componentes de la velocidad media.
- $\nu$  es la viscosidad cinemática.

- $\nu_t$  es la viscosidad turbulenta.
- $\sigma_k$  es un parámetro del modelo (típicamente  $\sigma_k = 1,0$ ).
- $P_k$  es la producción de energía cinética turbulenta.
- $\epsilon$  es la tasa de disipación de energía cinética turbulenta.

## 2. Ecuación para $\epsilon$ (tasa de disipación):

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \frac{\epsilon}{k} P_k - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.23)$$

Donde:

- $\epsilon$  es la tasa de disipación de energía cinética turbulenta.
- $\sigma_\epsilon$  es un parámetro del modelo (típicamente  $\sigma_\epsilon = 1,3$ ).
- $C_1$  y  $C_2$  son constantes del modelo (típicamente  $C_1 = 1,44$  y  $C_2 = 1,92$ ).

La producción de energía cinética turbulenta  $P_k$  se define como:

$$P_k = \nu_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \quad (2.24)$$

La viscosidad turbulenta  $\nu_t$  se calcula como:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.25)$$

### **k-omega:**

Este modelo se clasifica dentro de los modelos de cierre de segundo orden o de dos ecuaciones, ya que utiliza dos ecuaciones diferenciales parciales (6) adicionales para resolver las propiedades del flujo turbulento.

Las componentes del modelo son:

#### 1. Energía Cinética Turbulenta ( $k$ ):

- Representa la energía contenida en las fluctuaciones turbulentas del flujo.
- Se mide en unidades de energía por unidad de masa ( $m^2/s^2$ ).
- La ecuación para  $k$  describe el balance entre la producción y la disipación de la energía cinética turbulenta.

#### 2. Frecuencia Específica de Disipación ( $\omega$ ):

- Representa la tasa a la cual la energía cinética turbulenta se disipa en energía térmica.
- Se mide en unidades de  $1/s$ .
- La ecuación para  $\omega$  describe el balance entre la generación y la disipación de la frecuencia específica de disipación.

Y las ecuaciones del modelo:

1. **Ecuación de Energía Cinética Turbulenta ( $k$ ):**

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = P_k - \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ (\nu + \sigma_k \nu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (2.26)$$

2. **Ecuación de la Frecuencia Específica de Disipación ( $\omega$ ):**

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U_i \frac{\partial \omega}{\partial x_i} = \frac{\gamma}{\nu_t} P_k - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ (\nu + \sigma_\omega \nu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + 2(1 - F_1) \frac{\sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \quad (2.27)$$

Los parámetros de estas ecuaciones se definen como:

- $P_k$ : Término de producción de energía cinética turbulenta.
- $\beta, \beta^*, \gamma, \sigma_k, \sigma_\omega, \sigma_{\omega 2}$ : Constantes del modelo que se determinan empíricamente.
- $\nu$ : Viscosidad cinemática del fluido.
- $\nu_t$ : Viscosidad turbulenta, definida como  $\nu_t = \frac{k}{\omega}$ .

El modelo  $k - \omega$  es conocido por su robustez y precisión cerca de las paredes, donde las tasas de disipación de energía son altas.

Sin embargo este modelo es sensible a las condiciones de frontera lejos de la pared, lo que puede llevar a resultados menos precisos en esas regiones. Por esta razón, se desarrollaron variantes híbridas como el modelo SST (Shear Stress Transport), que combina las ventajas del modelo  $k - \omega$  y el modelo  $k - \epsilon$  para mejorar la precisión en diferentes regiones del flujo.

**k-omega SST:**

El modelo  $k - \omega$  SST (Shear Stress Transport) es una variante del modelo  $k - \omega$  estándar. Este modelo combina las ventajas del modelo  $k - \omega$  en la región cercana a la pared y las del modelo  $k - \epsilon$  en la región lejos de la pared, proporcionando una mayor precisión y robustez en una amplia variedad de flujos turbulentos.

1. **Mejoras del Modelo SST:**

- El modelo  $k - \omega$  SST utiliza una función de mezcla  $F_1$  que permite la transición suave entre el modelo  $k - \omega$  en la región cercana a la pared y el modelo  $k - \epsilon$  en la región lejos de la pared.
- La viscosidad turbulenta  $\nu_t$  se ajusta (6) para tener en cuenta el transporte de esfuerzos cortantes, mejorando la precisión en flujos con gradientes de velocidad altos.

2. **Ecuaciones de Mezcla:**

La función de mezcla  $F_1$  está definida como:

$$F_1 = \tanh \left( \left( \left( \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{CD_k \omega y^2} \right] \right) \right)^4 \right) \quad (2.28)$$

donde  $y$  es la distancia más cercana a la pared y  $CD_k\omega$  es una variable de corrección cruzada entre  $k$  y  $\omega$ .

El modelo  $k - \omega$  SST es más robusto y preciso que los modelos  $k - \omega$  y  $k - \epsilon$  por separado, especialmente en flujos con separación y recirculación. Sin embargo, sigue siendo importante tener en cuenta las condiciones de frontera y la calidad de la malla para obtener resultados precisos.

### Otras Formas de Calcular la Turbulencia

A parte de los modelos RANS, existen métodos de resolución más precisos de la turbulencia de un fluido. Sin embargo, estos métodos son altamente costosos computacionalmente, lo cual provoca que solo sean utilizados en contextos muy específicos:

- **Large-Eddy Simulation (LES):** En LES, las grandes estructuras turbulentas son resueltas directamente por las ecuaciones de Navier-Stokes, mientras que las pequeñas escalas, que son más universales y menos dependientes del flujo específico, son modeladas utilizando un modelo de submalla.
- **Direct Numerical Simulations (DNS):** La simulación numérica directa es una técnica donde todas las escalas de la turbulencia, desde las más grandes hasta las más pequeñas, son resueltas directamente por las ecuaciones de Navier-Stokes sin ningún tipo de modelado de turbulencia. Esto proporciona la descripción más detallada y precisa del flujo turbulento, pero a un costo computacional extremadamente alto, lo que limita su uso a flujos con números de Reynolds relativamente bajos y dominios pequeños. DNS es principalmente utilizado en investigación para obtener una comprensión fundamental de los mecanismos de la turbulencia.

## 2.5. Forma de la Llama

El estudio de la llama en un quemador gaseoso es crucial para mejorar la eficiencia de la combustión y reducir las emisiones contaminantes. La dinámica de fluidos computacional (CFD) proporciona una herramienta poderosa para analizar la forma de la llama, el *lift-off*, la amplitud y otros fenómenos relacionados.

La forma de la llama es un indicador clave del comportamiento de la combustión en un quemador. En un estudio CFD, la forma de la llama puede ser visualizada y analizada utilizando varios métodos:

**Visualización de la Temperatura** La temperatura es una variable fundamental para visualizar la forma de la llama. En ParaView, se pueden utilizar filtros como *Contour* y *IsoVolume* para crear mapas de contorno y volúmenes isométricos que representen la distribución de la temperatura en la llama.

- **Contour:** Este filtro permite crear superficies de igual temperatura, destacando las regiones de combustión intensa.
- **IsoVolume:** Este filtro ayuda a visualizar regiones específicas de temperatura, proporcionando una visión tridimensional de la forma de la llama.

**Concentración de Especies Químicas** La distribución de especies químicas, como el oxígeno ( $O_2$ ) y el monóxido de carbono (CO), también es útil para definir la forma de la llama. Las concentraciones de estas especies pueden ser visualizadas de manera similar a la temperatura, proporcionando información adicional sobre las zonas de reacción y las regiones de mezcla de combustible y oxidante.

### 2.5.1. Lift-Off

El *lift-off* de una llama en un quemador es un fenómeno crítico que afecta la estabilidad de la combustión, las emisiones y la eficiencia del quemador. En este apartado se explican brevemente sus causas y efectos, considerando variables como la composición de la mezcla, la velocidad de los flujos, el efecto del *swirler* y el dosado relativo. Se discute cómo estos factores influyen en la forma de la llama, las emisiones de NOx y el calor liberado en la combustión.

#### Concepto de Lift-Off:

El *lift-off* se produce cuando la base de la llama se eleva por encima de la salida del quemador. Este fenómeno puede ser causado por una combinación de factores, tales como la velocidad de los flujos de entrada, la turbulencia inducida por el *swirler*, y la composición de la mezcla combustible. Este fenómeno es crucial en el diseño y operación de quemadores porque afecta la estabilidad de la llama, las emisiones y la eficiencia de la combustión.

#### Causas del *Lift-Off*

Composición de la Mezcla:

La proporción de aire y combustible en la mezcla influye significativamente en el *lift-off*.

- **Proporción de aire en la premezcla:** Si la premezcla tiene una mayor proporción de aire, la mezcla será más pobre, lo que puede aumentar el *lift-off*. Una mezcla más pobre tiene una velocidad de llama menor, lo que requiere una mayor velocidad del flujo para mantener la llama anclada.

Velocidad de los Flujos:

La velocidad tanto del aire puro a través del *swirler* como de la premezcla influye en el *lift-off*.

- **Aumento de la velocidad del aire puro:** Incrementar la velocidad del aire puro puede desplazar la llama hacia arriba debido a un aumento en la velocidad del flujo.
- **Aumento de la velocidad de la premezcla:** Una mayor velocidad de la premezcla puede tener un efecto similar, aumentando el *lift-off* debido a la mayor energía cinética del flujo.

Efecto del *Swirler*:

El *swirler* introduce turbulencia y rotación en el flujo de aire, lo que puede influir en la estabilidad de la llama y el *lift-off*.

- **Intensidad de *swirl*:** Un mayor *swirl* puede estabilizar la llama más cerca de la salida del quemador, reduciendo el *lift-off*, al incrementar la recirculación de gases calientes y mejorar la mezcla.

Dosado Relativo:

El dosado relativo ( $\phi$ ) es la razón entre la cantidad de combustible presente en la mezcla y la cantidad de combustible en una mezcla estequiométrica.

- **Dosado relativo bajo ( $\phi < 1$ ):** Mezclas pobres ( $\phi$  bajo) pueden aumentar el *lift-off* debido a la menor velocidad de llama.
- **Dosado relativo alto ( $\phi > 1$ ):** Mezclas ricas ( $\phi$  alto) pueden reducir el *lift-off* debido a una mayor velocidad de llama.

### Efectos del *Lift-Off*

Forma de la Llama:

El *lift-off* afecta significativamente la forma de la llama.

- **Mayor *lift-off*:** La llama se vuelve más alargada y menos estable, con una mayor posibilidad de fluctuaciones y oscilaciones.
- **Menor *lift-off*:** La llama es más compacta y estable, lo que puede mejorar la eficiencia de la combustión y la transferencia de calor.

Emisiones de NOx:

Las emisiones de óxidos de nitrógeno (NOx) están directamente influenciadas por el *lift-off*.

- **Mayor *lift-off*:** Aumenta la probabilidad de formación de NOx debido a las mayores temperaturas alcanzadas en la zona de post-combustión.
- **Menor *lift-off*:** Puede reducir las emisiones de NOx al mantener las temperaturas de combustión más bajas y uniformes.

Calor Liberado:

El calor liberado en el proceso de combustión es afectado por el *lift-off* y la estabilidad de la llama.

- **Mayor *lift-off*:** Puede resultar en una combustión incompleta, liberando menos calor y reduciendo la eficiencia del quemador.
- **Menor *lift-off*:** Favorece una combustión más completa y uniforme, mejorando la eficiencia y la liberación de calor.

### 2.5.2. Fluctuaciones de la Llama

Las fluctuaciones en la posición y forma de la llama son debidas a inestabilidades en el flujo y en la reacción química.

**Medición de la Amplitud** Para medir la amplitud de la llama:

- Se utilizan series temporales de simulaciones CFD para capturar la dinámica de la llama.
- Se aplican técnicas de análisis de datos como el *Fast Fourier Transform* (FFT) para identificar las frecuencias y amplitudes de las fluctuaciones.
- Se visualizan las variaciones en la posición de la llama utilizando filtros de animación en ParaView.

**Análisis de Inestabilidades** La amplitud de las fluctuaciones puede estar relacionada con inestabilidades de flujo y combustión. El análisis de estas inestabilidades es crucial para mejorar la estabilidad de la llama y prevenir apagones o combustión incompleta.

## 2.6. El Radical Hidroxilo (OH) en una Llama de un Quemador Gaseoso

En el análisis de combustión utilizando dinámica de fluidos computacional (CFD), el radical hidroxilo (OH) es una especie química clave que proporciona información valiosa sobre el proceso de combustión. La presencia y concentración de OH en una llama son indicadores directos de la región de reacción y de la intensidad de la combustión. En este documento, se discute la importancia de estudiar la posición y cantidad de OH en una cámara de combustión y se presentan los métodos para analizar estos resultados en un estudio CFD.

### 2.6.1. Importancia del Radical OH

El OH es un intermediario clave en las reacciones de oxidación de los hidrocarburos. Su presencia y concentración proporcionan información crucial sobre la tasa de reacción y la eficiencia de la combustión. En particular:

- **Indicador de la Zona de Reacción:** El OH se concentra principalmente en la zona de reacción de la llama, donde ocurre la oxidación activa del combustible. Su distribución espacial puede utilizarse para identificar la estructura y la ubicación de la llama.
- **Temperatura de la Llama:** La concentración de OH es proporcional a la temperatura de la llama. Por lo tanto, la medición del OH puede ser utilizada para estimar la temperatura local en diferentes regiones de la llama.
- **Validación de Modelos:** En CFD, la predicción de la concentración de OH es una herramienta útil para validar modelos de combustión. La comparación de los resultados simulados con datos experimentales de OH permite ajustar y mejorar la precisión de los modelos.

### 2.6.2. Detección y Medición del OH

La detección experimental del OH se realiza comúnmente utilizando técnicas de diagnóstico óptico, en el caso del quemador experimental, se están utilizando imágenes de quimioluminiscencia de la llama filtradas a una longitud de onda de 310 nm, en la cual emite el radical OH excitado.

### 2.6.3. Modelado del OH en CFD

En CFD, el modelado del OH implica la resolución de las ecuaciones de transporte para las especies químicas y la incorporación de mecanismos cinéticos detallados. Algunos aspectos importantes a considerar son

#### **Mecanismos Cinéticos:**

La precisión en la predicción del OH depende de los mecanismos cinéticos utilizados. Los mecanismos detallados incluyen una serie de reacciones elementales que describen la formación y destrucción del OH. Ejemplos de mecanismos comunes son el mecanismo de GRI-Mech y otros desarrollados específicamente para ciertos combustibles.

#### **Resolución Espacial y Temporal:**

Para capturar correctamente la distribución del OH, es esencial una resolución espacial y temporal adecuada. Las zonas de reacción donde se concentra el OH suelen ser muy delgadas, requiriendo mallas finas y pasos de tiempo pequeños en la simulación.

#### **Interacción con Turbulencia:**

En flujos turbulentos, la interacción entre la turbulencia y la combustión afecta significativamente la distribución del OH. Modelos como LES (Large Eddy Simulation) y RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) con acoplamiento a modelos de combustión pueden capturar estas interacciones de manera más precisa.

#### **Consideraciones Prácticas:**

Al realizar simulaciones CFD de una llama en un quemador gaseoso con enfoque en el OH, se deben considerar varios aspectos prácticos:

- **Condiciones de Frontera:**

Definir correctamente las condiciones de frontera para el flujo de entrada y salida, así como para las paredes del quemador, es crucial para obtener resultados precisos.

- **Esquemas Numéricos:**

Utilizar esquemas numéricos adecuados que minimicen la dispersión y difusividad numérica es importante para resolver las finas estructuras de la llama.

- **Validación y Verificación:**

Comparar los resultados de la simulación con datos experimentales de OH es esencial para validar el modelo. Esto incluye tanto las distribuciones espaciales como las concentraciones absolutas.

El radical hidroxilo (OH) es una especie química clave en la combustión, cuya concentración y distribución proporcionan información valiosa sobre la estructura y comportamiento de una llama. En el contexto de CFD, el modelado preciso del OH es fundamental para la simulación y validación de llamas en quemadores gaseosos. A través de mecanismos cinéticos detallados, una adecuada resolución espacial y temporal, y la consideración de la interacción con la turbulencia, es posible obtener predicciones precisas y útiles para el diseño y optimización de procesos de combustión.

### 3. Entorno de Trabajo

En este apartado se describen los programas OpenFOAM y ParaView, que serán utilizados para estudiar el caso a estudiar.

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) es un software de código abierto ampliamente utilizado para la simulación de problemas complejos en dinámica de fluidos. Proporciona una amplia gama de herramientas para modelar y analizar flujos de fluidos, transferencia de calor y procesos de combustión. En el contexto de este estudio, OpenFOAM permitirá la simulación detallada del comportamiento del flujo y la interacción de la llama dentro de la cámara de combustión, proporcionando información crucial sobre parámetros como la distribución de temperatura, velocidad y concentración de especies.

ParaView es un software de visualización y análisis de datos, también de código abierto, que se utiliza para representar gráficamente los resultados obtenidos de simulaciones numéricas. ParaView permite visualizar y analizar grandes volúmenes de datos de manera interactiva, facilitando la interpretación de los resultados generados por OpenFOAM. En este estudio, ParaView será fundamental para analizar y visualizar la estructura de la llama, la distribución de temperaturas y otras variables relevantes, ayudando a comprender mejor el comportamiento del flujo dentro de la cámara de combustión.

El uso combinado de OpenFOAM y ParaView proporcionará una comprensión detallada y visualmente intuitiva del fenómeno de combustión en la cámara, permitiendo realizar análisis precisos y optimizaciones en el diseño y operación del sistema.

#### 3.1. OpenFOAM

- Código Abierto:

OpenFOAM es un software de código abierto, lo que permite a los usuarios acceder y modificar el código fuente para adaptarlo a sus necesidades específicas. Esto fomenta la colaboración y el desarrollo continuo por parte de la comunidad científica y de ingeniería.

- Solvers:

OpenFOAM incluye una amplia variedad de solvers prediseñados para resolver diferentes tipos de problemas en dinámica de fluidos, transferencia de calor, dinámica de partículas, y combustión, entre otros. Algunos ejemplos de solvers son `simpleFoam` para flujo incompresible estacionario, `pisoFoam` para flujo transitorio, y `reactingFoam` para problemas de combustión.

- Flexibilidad y Extensibilidad:

Los usuarios pueden desarrollar nuevos solvers y utilidades personalizadas utilizando el lenguaje de programación C++, aprovechando la estructura modular y extensible de OpenFOAM.

- Amplias Capacidades de Post-Procesado:

Junto con herramientas como ParaView, OpenFOAM facilita el análisis y visualización de los resultados de simulación, permitiendo un estudio detallado del comportamiento del flujo y otros parámetros.

### 3.1.1. Estructura de Carpetas y Ficheros en OpenFOAM

La estructura de carpetas y ficheros de OpenFOAM está organizada de manera lógica para facilitar la configuración y ejecución de simulaciones. A continuación, se describe la estructura del caso de simulación a estudiar en OpenFOAM.

```
<case directory>/
0/
  U
  p
  ...
constant/
  chemistryProperties
  g
  momentumTransport
  ...
system/
  controlDict
  fvSchemes
  fvSolution
  ...
postProcessing/
<optional folders>
```

#### Directorio 0/

El directorio `0/` contiene los ficheros de condiciones iniciales y de contorno. Cada fichero dentro de este directorio define una variable del campo, como la velocidad ( $U$ ), la presión ( $p$ ), y otras propiedades relevantes. Los ficheros suelen tener el siguiente formato:

```
dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];
internalField   uniform 0;
boundaryField
{
  ...
}
```

#### Directorio constant/

El directorio `constant/` contiene los ficheros que definen las propiedades físicas y modelos utilizados en la simulación.

- **chemistryProperties:** Contiene las propiedades y parámetros necesarios para la simulación de reacciones químicas, incluyendo información sobre mecanismos de reacción y cinética química.
- **g:** Define el vector de aceleración gravitacional utilizado en la simulación.

- **momentumTransport:** Configura los modelos y propiedades asociados al transporte de cantidad de movimiento, incluyendo parámetros para modelos viscoelásticos o no newtonianos.

### Directorio `system/`

El directorio `system/` contiene los ficheros de configuración del sistema que controlan la ejecución de la simulación.

- **controlDict:** Este fichero controla el tiempo de simulación, los intervalos de salida de datos, y otras configuraciones globales.

```
application    simpleFoam;
startFrom      startTime;
startTime      0;
stopAt         endTime;
endTime        1000;
deltaT         1;
writeControl    timeStep;
writeInterval  100;
```

- **fvSchemes:** Define los esquemas numéricos utilizados para discretizar las ecuaciones diferenciales.

```
ddtSchemes
{
    default      Euler;
}
gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
}
divSchemes
{
    default      none;
    div(phi,U)   Gauss linearUpwind grad(U);
}
laplacianSchemes
{
    default      Gauss linear corrected;
}
interpolationSchemes
{
    default      linear;
}
```

- **fvSolution:** Contiene los parámetros de los solvers y las tolerancias de los solvers lineales.

```
solvers
{
  p
  {
    solver          PCG;
    preconditioner  DIC;
    tolerance       1e-06;
    relTol          0;
  }
  U
  {
    solver          PBiCG;
    preconditioner  DILU;
    tolerance       1e-05;
    relTol          0.01;
  }
}
SIMPLE
{
  nNonOrthogonalCorrectors 0;
  residualControl
  {
    p          1e-2;
    U          1e-3;
  }
}
```

### Directorio postProcessing/

El directorio `postProcessing/` se crea automáticamente durante la simulación y contiene los resultados de salida, como campos de variables, estadísticas y otros datos generados durante el post-procesamiento (11).

### Ficheros Adicionales

En el directorio de trabajo se tienen ficheros adicionales para poder llevar a cabo el estudio, el primero es el fichero `lanzaOF8` con el cual se puede enviar el caso al cluster de la UPV para ejecutar el caso en un mayor número de procesadores. La estructura de este fichero es la siguiente:

```
#$ -cwd          # Ejecutar en el directorio actual.
#$ -pe mpi 256   # Solicitar un entorno paralelo con 256 procesos MPI.
#$ -l h_vmem=2g,h_rt=12:00:00 # Solicitar 2 GB de memoria virtual
por núcleo y un tiempo de ejecución de 12 horas.
### -l c7=true   # (Comentado) Solicitar nodos con una característica
específica (por ejemplo, nodos con CentOS 7).
#$ -l dell=true  # Solicitar nodos Dell.
```

```
source /soft/c7/OpenFOAM/OpenFOAM-8/etc/bashrc
```

```
#decomposePar -constant
mpirun -np 256 reactingFoam -parallel >> log
#reconstructPar
```

Las líneas que comienzan con:

```
#$
```

son directivas del sistema de colas que configuran cómo se debe ejecutar el trabajo.

Este script está configurado para enviar un trabajo de simulación de OpenFOAM a un clúster de computación utilizando 256 núcleos en paralelo. Configura el entorno de OpenFOAM, y ejecuta reactingFoam en paralelo, redirigiendo la salida a un fichero de log. Las líneas comentadas con pasos adicionales para preparar la simulación para ejecución paralela (decomposePar) y para recombinar los resultados (reconstructPar).

También está el fichero de generación de residuales, el cual tiene la estructura:

```
set title "Residuals"
set ylabel 'Residual'
set xlabel 'Iteration'
plot "< cat log | grep 'Solving for Ux' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'Ux' with lines,\
"< cat log | grep 'Solving for Uy' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'Uy' with lines,\
"< cat log | grep 'Solving for Uz' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'Uz' with lines,\
"< cat log | grep 'Solving for CH4' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'CH4' with lines,\
"< cat log | grep 'Solving for CO,' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'CO' with lines,\
"< cat log | grep 'Solving for epsilon' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'epsilon' with lines,\
"< cat log | grep 'Solving for k' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'k' with lines
pause 1
reread
#"< cat log | grep 'Solving for p' | cut -d' ' -f9 |sed -n 'p;N;N;N'|
tr -d ','" title 'p' with lines
#"< cat log | grep 'Solving for p' | cut -d' ' -f9 | tr -d ','
" title 'p' with lines
```

En el cual se puede observar una configuración inicial de los ejes y las etiquetas de los mismos. Posteriormente una lectura del log y un plot de cada una de las variables y especies indicadas en el script.

Este script se ejecuta con GNUplot y se utiliza para visualizar en tiempo real los residuos de varias variables (como velocidad, concentración de especies y parámetros turbulentos) a partir del archivo log generado por un solver de OpenFOAM. Utiliza filtros y comandos para extraer y plotear estos residuos, ayudando a monitorizar la convergencia de la simulación.

## 3.2. Paraview

ParaView es una aplicación de código abierto para la visualización y análisis de datos científicos. Desarrollado por Kitware, en colaboración con el Laboratorio Nacional de Los Álamos y Sandia National Laboratories, ParaView es capaz de manejar grandes conjuntos de datos provenientes de simulaciones numéricas, como las que se realizan con OpenFOAM.

### 3.2.1. Características Principales de ParaView

ParaView ofrece una serie de características que lo hacen una herramienta indispensable para el análisis de datos CFD (Computational Fluid Dynamics), especialmente en estudios complejos como los de combustión en cámaras de combustión. Entre sus principales características se encuentran:

- **Visualización en 3D:**

ParaView permite la visualización tridimensional de datos, lo cual es crucial para entender la estructura y comportamiento de fenómenos complejos.

- **Procesamiento en paralelo:**

Capacidad de manejar grandes conjuntos de datos utilizando procesamiento en paralelo, lo cual es ideal para simulaciones de alta resolución.

- **Interfaz de usuario intuitiva:**

Una interfaz gráfica amigable que facilita la navegación y análisis de datos sin necesidad de conocimientos avanzados en programación.

- **Soporte para múltiples formatos de datos:**

Compatible con una amplia variedad de formatos de archivo, incluyendo los generados por OpenFOAM.

- **Herramientas de post-procesamiento avanzadas:**

Incluye una amplia gama de filtros y herramientas para analizar y visualizar datos, como corte de planos, isosuperficies, trazado de partículas, entre otros.

### 3.2.2. Utilidad de ParaView en el Estudio de una Llama en una Cámara de Combustión

El estudio de una llama en una cámara de combustión implica el análisis de diversas propiedades y especies químicas. ParaView facilita este proceso a través de sus herramientas de visualización y análisis. Algunas de las utilidades específicas incluyen:

#### **Análisis de Especies Químicas**

ParaView permite la visualización de las concentraciones de diferentes especies químicas presentes en la llama. Esto es esencial para estudiar los procesos de combustión y las reacciones químicas que ocurren dentro de la cámara de combustión.

#### **Análisis de Propiedades Termodinámicas y de Flujo**

La visualización de propiedades como la temperatura, la velocidad del flujo, la presión y la densidad es fundamental para comprender el comportamiento de la llama y su interacción con el entorno. ParaView proporciona herramientas para representar estas propiedades de manera detallada.

### **Principales Filtros Utilizados en ParaView**

Para el análisis de datos de CFD en una cámara de combustión, algunos de los filtros más utilizados en ParaView son:

- **Slice (Corte):**  
Permite visualizar secciones transversales de los datos, lo cual es útil para analizar la estructura interna de la llama y la distribución de especies químicas y propiedades.
- **IsoSurface (Isosuperficie):**  
Utilizado para visualizar superficies de igual valor de una determinada variable (como temperatura o concentración de una especie), ayudando a identificar zonas de interés dentro de la cámara.
- **StreamTracer (Trazador de Partículas):**  
Permite visualizar las líneas de flujo dentro de la cámara de combustión, mostrando la dirección y la magnitud del flujo de gases.
- **Contour (Contorno):**  
Similar a las isosuperficies, pero en dos dimensiones, este filtro es útil para analizar la variación de propiedades en planos específicos.
- **Glyph (Glifo):**  
Utilizado para representar vectores de velocidad, mostrando la dirección y magnitud de los flujos en diferentes puntos de la malla.
- **Volume Rendering (Renderizado Volumétrico):**  
Permite la visualización de los datos en tres dimensiones de manera continua, útil para obtener una visión global de la distribución de propiedades en toda la cámara de combustión.

ParaView es una herramienta poderosa para el análisis y visualización de datos CFD provenientes de simulaciones de OpenFOAM. Su capacidad para manejar grandes volúmenes de datos, junto con sus avanzadas herramientas de post-procesamiento, lo hacen indispensable para el estudio detallado de fenómenos complejos como la combustión en cámaras de combustión. La utilización de filtros específicos permite obtener una comprensión profunda de las propiedades y comportamientos de la llama, facilitando así el análisis y la optimización de los procesos de combustión.

## 4. Caso Base de Partida

Este estudio se basa en el TFG realizado por Rubén García Ferrer (19) como primera iteración de un estudio CFD en la geometría de la cámara de combustión ubicada en el CMT. Este caso base se llevó a cabo simulando un flujo estacionado no reactivo, sin embargo, el refinamiento de la malla es un muy buen punto de partida para empezar a ejecutar el solver de reactingFOAM sobre esta malla y poder realizar el estudio de estos resultados.

### 4.1. Geometría de la Cámara de Combustión

El modelo 3D del quemador de gas que se ha utilizado en este estudio, ha sido diseñado, confeccionado y refinado por el departamento de motores y máquinas térmicas (CMT). Gracias a la amplia experiencia de este departamento en el sector de la combustión, se ha podido obtener una geometría precisa y optimizada de la cámara, que se ajusta adecuadamente a las características del quemador de gas experimental ubicado en el CMT. Esta geometría permanecerá invariable a lo largo del estudio y se puede observar en la figura 2.

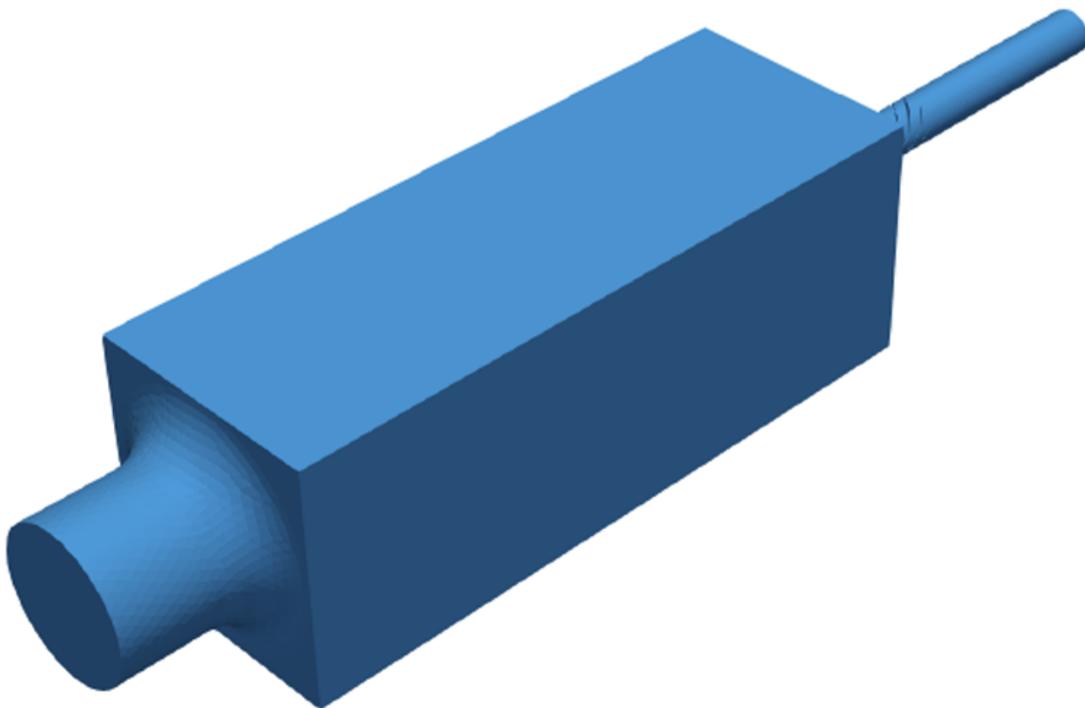


Figura 2: Geometría preliminar del quemador de gas experimental proporcionada por el departamento CMT - Motores Térmicos.

Este quemador tiene 3 entradas diferentes (inlets) por las cuales se suministra en forma gaseosa cada uno de los componentes que formarán parte de la combustión. Para observar estas entradas de forma más precisa se indica cada una de ellas en la figura 3.

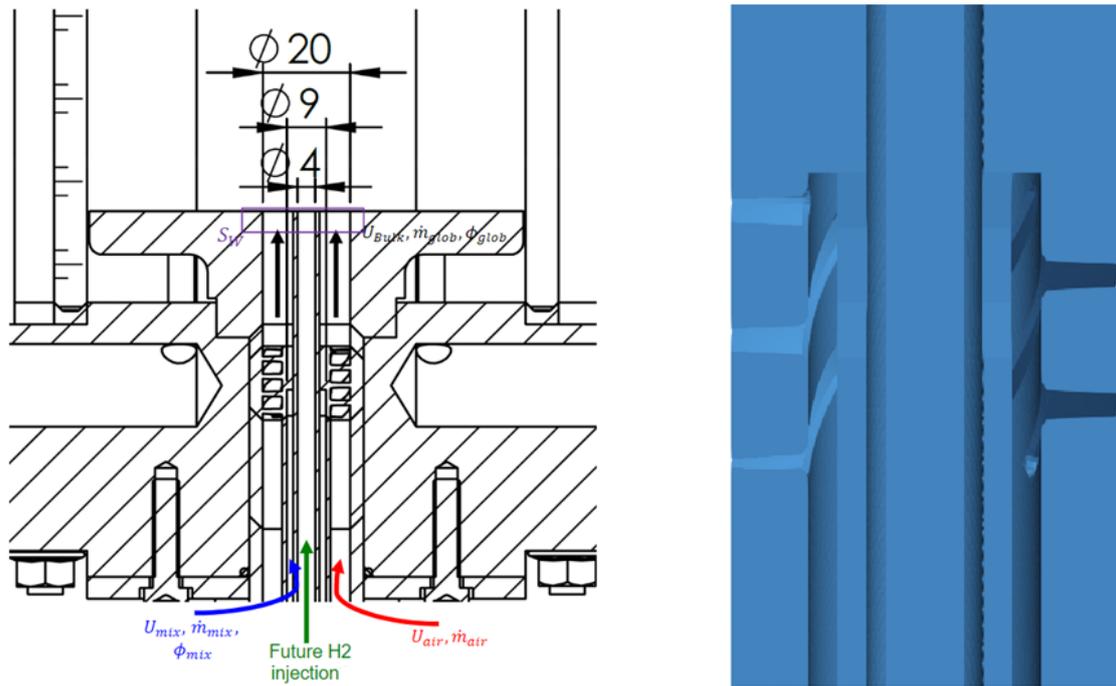


Figura 3: Croquis de la sección del quemador de gas donde se aprecia la entrada de cada una de las especies.

En la figura 3 se puede observar como por el conducto exterior, que es a su vez el más ancho, circula una masa de aire  $\dot{m}_{air}$  a una velocidad  $U_{air}$ . Por el conducto intermedio se introduce una premezcla de aire y metano  $\dot{m}_{mix}$  a una velocidad  $U_{mix}$  y con un ratio de equivalencia  $\phi_{mix}$ .

Por último, en el conducto central es en el que en futuros estudios de este quemador se introducirá hidrógeno gaseoso (H<sub>2</sub>) para la realización de distintos análisis del comportamiento de esta mezcla en una combustión.

En la imagen de la derecha de la figura 3 se puede observar seccionada la zona del swirler o torbellinador que afecta a la entrada de aire puro y se encuentra justo antes del punto en que el aire y la premezcla entran en contacto, para poco más adelante entrar en la cámara de combustión, donde las reacciones químicas más importantes empiezan a producirse.

Este swirler tiene un ángulo de 45 grados fijo en el estudio, ya que las variables que se modifican para obtener resultados son las condiciones de entrada de los distintos fluidos.

Los datos precisos de la geometría utilizada se pueden observar en la tabla 1.

Elemento	Dimensión [mm]
Longitud	507
Diámetro inyección aire	20
Diámetro inyección mezcla	9
Diámetro inyección hidrógeno	4
Distancia entre paredes del quemador	100
Diámetro outlet	60
Longitud tubos	167
Longitud cámara de combustión	250
Longitud outlet	90

Tabla 1: Dimensiones del quemador de gas.

#### 4.2. Malla de la Cámara de Combustión

El mallado de la geometría de la cámara de combustión se ha realizado teniendo en cuenta las distintas etapas que atraviesa el fluido y los estados en que este se encuentra en cada una. Para ello, se ha dividido esta geometría en diferentes zonas y ajustado la densidad y tamaño de celdas de acuerdo a la importancia de cada etapa.

Las etapas donde se espera que se produzca la combustión o que el flujo tenga mayor gradiente de velocidades requerirán más precisión y por tanto más densidad de celdas que las zonas donde la velocidad es constante o no se produce combustión.

El esquema de la división de etapas de la malla se puede observar en la figura 4.

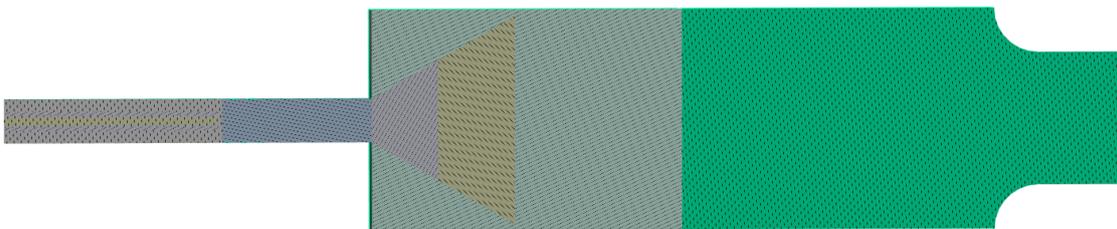


Figura 4: Esquema de la división de etapas de la malla.

La malla utilizada en el análisis consta de diferentes regiones, cada una con características específicas que requieren diversos niveles de refinamiento. A continuación, se describen estas regiones y los motivos por los cuales se ha decidido aplicar diferentes tamaños de celda.

- **Tubo de Aire:** La primera región corresponde al tubo de aire, identificado por un color marrón-grisáceo en el exterior de la zona de entrada (izquierda). Esta zona requiere un refinamiento inicial para capturar adecuadamente los detalles del flujo de aire que entra en el sistema.

- **Tubo de Mezcla:** Colindante al tubo de aire, se encuentra el tubo de mezcla, representado por un tono gris más claro. Debido al reducido espesor de esta zona, es necesario un mayor refinamiento para asegurar que los detalles de la premezcla que circula por este tubo se capturen correctamente.
- **Tubo de Hidrógeno:** El tubo central, identificado por el color amarillo, corresponde al tubo de hidrógeno. Este tubo requiere un refinamiento específico distinto al de los otros tubos para optimizar el coste computacional sin perder precisión en la representación del flujo de hidrógeno.
- **Swirler:** Avanzando hacia la derecha, cerca de la cámara de combustión, se encuentra una región azul-grisácea conocida como el swirler. Aquí, el gradiente de velocidades se incrementa debido a la geometría, lo que exige un refinamiento adecuado para capturar estos cambios.
- **Cono 1:** A la entrada de la cámara de combustión se encuentra el primer cono, identificado por un color rosáceo. En esta región, los gradientes de velocidad son elevados, por lo que se requiere un tamaño de celda menor para asegurar una captura precisa de los fenómenos que ocurren.
- **Cono 2:** Más alejado de la entrada de la cámara de combustión, el segundo cono está representado por un color anaranjado. En esta región, la densidad de la malla puede ser menor, permitiendo así reducir el coste computacional sin comprometer la precisión del análisis.
- **Media Cámara de Combustión:** Al inicio de la cámara de combustión, representada por un color verde claro, se encuentran los mayores gradientes de velocidad. Aquí, es crucial reducir el tamaño de celda para capturar de manera efectiva los fenómenos que ocurren en esta región.
- **Tamaño Base:** El tamaño base de la malla se aplica en todo el dominio, excepto en las regiones donde se ha especificado un refinamiento particular. Esta área, indicada por un color verde oscuro, mantiene un tamaño de celda estándar debido a la ausencia de gradientes significativos que requieran un mayor refinamiento.

Por otro lado, es importante considerar la eficiencia computacional, dado que una malla excesivamente fina puede exigir una capacidad de cálculo considerable. Por esta razón, las celdas en cada una de las zonas se han definido con un tamaño específico (ver Tabla 3.2), basándose en la experiencia del departamento en el campo de CFD con quemadores de gas.

<b>Zona</b>	<b>Tamaño de celda [mm]</b>
<b>Tamaño base</b>	4
<b>Cono 1</b>	0.45
<b>Cono 2</b>	1
<b>Media cámara de combustión inferior</b>	2
<b>Swirler</b>	0.3
<b>Tubo aire</b>	3
<b>Tubo mezcla</b>	0.5
<b>Tubo hidrógeno</b>	1.25

Tabla 2: Tamaño de celdas en cada una de los regiones predefinidas.

Por otra parte para mantener la convergencia en las celdas más cercanas a la pared y cumplir con las condiciones de la capa límite que se debe generar, se debe obtener una  $y^+$  de alrededor de 1. Para ello, el tamaño de estas celdas se ajusta a los valores establecidos en la tabla 3 mediante una calculadora de  $y^+$ .

<b>Tubo</b>	<b>Altura primera celda [mm]</b>	<b>Número de capas [-]</b>
<b>Aire</b>	$1,4 \cdot 10^{-5}$	10
<b>Premezcla</b>	$6,9 \cdot 10^{-6}$	10
<b>Hidrógeno</b>	-	-

Tabla 3: Valores de la altura de las primeras celdas de la capa límite.

En esta tabla se ha ignorado el refinamiento del conducto de hidrógeno ya que no se contempla en este estudio.

Una vez ajustados todos estos valores, la malla se conforma de un total de 14 millones de celdas, con los valores más relevantes recogidos en la tabla 4.

<b>Número de celdas [-]</b>	14258643
<b>Máximo aspect ratio [-]</b>	72.86
<b>Máxima no ortogonalidad [-]</b>	79.30
<b>No ortogonalidad media [-]</b>	14.87
<b>Máximo skewness [-]</b>	3.115

Tabla 4: Valores más relevantes de la comprobación de la calidad de malla para el caso base.

## 5. Configuración del Caso Transitorio a la Combustión

Una vez obtenida una malla precisa y que se ajusta adecuadamente a los requerimientos tanto de la geometría como de los procesos que se van a estudiar, se debe configurar todo el sistema de ficheros y archivos necesarios por OpenFOAM para la ejecución del programa CFD.

Esta configuración consta de varios pasos, en primer lugar la determinación de las condiciones de contorno que se ajusten a la cámara experimental, en segundo lugar las condiciones iniciales del primer caso a estudiar (la variable entre casos es la cantidad de aire que se introduce por el conducto de entrada de la premezcla en relación a la cantidad de aire que se inyecta por el conducto de aire puro).

Tras determinar las condiciones iniciales y de contorno, se ajustan los ficheros de configuración de solver y de solución para la primera ejecución, además del fichero de control.

Por último, se configuran los ficheros encargados de la química y la combustión entre especies.

Con todo esto configurado solo faltaría generar manualmente un punto de calor que sea capaz de iniciar la combustión de los reactivos, ese procedimiento se explicará más adelante, ya que conviene generar iteraciones del caso con todas las nuevas especies y la nueva configuración para dejar que se estabilice antes de intentar generar la combustión.

### 5.1. Condiciones de Operación del Quemador

Antes de entrar en la configuración de cada condición de contorno e iniciales, es necesario conocer las condiciones de operación del quemador, que vienen especificadas en la tabla 5.

AP [-]	$\dot{m}$ total [kg/h]	Dosado Relativo ( $\phi$ ) [-]	$A_{fst}$ [-]	$T_{amb}$ [K]	$p_{amb}$ [Pa]
10 %	14.9	0.9	17.19	294	101325

Tabla 5: Datos de funcionamiento del quemador.

Siendo:

- AP: Ratio de aire que circula por el conducto de premezcla en relación al flujo de aire total.
- $\phi$ : Dosado relativo.
- $A_{fst}$ : Relación aire-combustible estequiométrica.

### 5.2. Condiciones de Contorno

Para determinar correctamente las condiciones de contorno usando el software OpenFOAM, se debe crear una carpeta en el directorio principal del caso llamada "0", que contiene las condiciones de contorno e iniciales para cada una de las variables que dominan la mecánica de fluidos.

En este caso, las variables de las cuales hay que determinar las condiciones de contorno son  $U$  (Velocidad),  $p$  (Presión),  $T$  (Temperatura),  $\alpha$  (Coeficiente de difusividad turbulenta para la transferencia de calor),  $\epsilon$  y  $k$  y  $\nu$  (Turbulencia).

### 5.2.1. Regiones del Problema

Cuando se importa la geometría a estudiar, ésta viene configurada con cada una de las regiones a las cuales se pueden aplicar condiciones una vez mallada la geometría, en el caso de la geometría del quemador, las diferentes regiones son las siguientes:

- *wall\_inlet\_air*:  
Todo el contorno de la pared del conducto de aire puro, incluyendo la zona del swirler.
- *wall\_inlet\_h2*:  
Contorno del tubo central que en este estudio se encuentra vacío y en el futuro contendrá la entrada de hidrógeno.
- *wall\_inlet\_premix*:  
Comprende las paredes del conducto por el que se introduce la premezcla, hasta que llega a el punto donde se empieza a mezclar con el aire puro.
- *wall\_inlet\_end*:  
Pequeña porción de pared que une los conductos de aire puro y premezcla.
- *wall\_cc\_inlet*:  
Pared perpendicular al tubo de la cámara de combustión, por la que entran todos los compuestos a la cámara.
- *wall\_cc*:  
Esta región comprende todas las demás paredes de la cámara de combustión, a excepción de la propia salida.
- *outlet*:  
Salida de todos los gases de la cámara de combustión.

### 5.2.2. Velocidad

Las condiciones más comunes de uso para la velocidad son:

- **fixedValue**: Establece un valor fijo de velocidad en la frontera.
  - *Uso típico*: Entradas de flujo (*inlets*) donde la velocidad de entrada es conocida.
- **zeroGradient**: Establece que el gradiente de la velocidad en la dirección normal a la frontera es cero.
  - *Uso típico*: Salidas de flujo (*outlets*) donde no hay información específica de la velocidad.

- **noSlip**: Establece que la velocidad en la frontera es cero.
  - *Uso típico*: Paredes sólidas donde el fluido está en reposo relativo a la pared.
- **slip**: Permite el deslizamiento del fluido a lo largo de la frontera.
  - *Uso típico*: Fronteras simétricas o superficies donde se ignoran los efectos de fricción.
- **pressureInletOutletVelocity**: Utilizada en fronteras donde el flujo puede entrar o salir del dominio, dependiendo de las condiciones de presión.
  - *Uso típico*: Salidas de flujo donde la presión es especificada y el flujo puede ser entrante o saliente.

Teniendo esto en cuenta, en el caso de estudio se ha utilizado la siguiente configuración:

```
wall_inlet_air
{
    type            noSlip;
}
wall_inlet_h2
{
    type            noSlip;
}
wall_inlet_premix
{
    type            noSlip;
}
wall_inlet_end
{
    type            noSlip;
}
wall_cc_inlet
{
    type            noSlip;
}
wall_cc
{
    type            noSlip;
}
```

La condición de contorno **noSlip** se utiliza en las paredes de la cámara de combustión porque refleja la realidad física de que el fluido en contacto con la pared no se mueve relativo a ella. Esto es fundamental para capturar correctamente los perfiles de velocidad y los gradientes de temperatura cerca de las paredes, lo que es importante en el estudio de procesos como la transferencia de calor y la formación de capas límite.

```
outlet
```

```
{
  type          pressureInletOutletVelocity;
  value         uniform (0 0 0);
}
```

La condición de contorno `pressureInletOutletVelocity` se usa en la salida de la cámara de combustión. Esta condición permite que el flujo pueda salir del dominio cuando la presión interna es mayor que la presión externa y permite la entrada de flujo si la presión externa es mayor. Esto es útil para modelar salidas donde el flujo no es estrictamente unidireccional y puede haber influencias de la presión atmosférica.

En resumen,

- `noSlip` en las paredes: Simula correctamente el comportamiento del fluido en contacto con superficies sólidas, esencial para capturar los efectos de la fricción y la transferencia de calor.
- `pressureInletOutletVelocity` en la salida: Permite el ajuste dinámico del flujo según las condiciones de presión, ideal para salidas abiertas a la atmósfera.

### 5.2.3. Presión

Las condiciones de contorno más utilizadas para la presión son:

- `fixedValue`: Establece un valor fijo de presión en la frontera.
  - *Uso típico*: Entradas de flujo (*inlets*) donde la presión de entrada es conocida.
- `zeroGradient`: Establece que el gradiente de la presión en la dirección normal a la frontera es cero.
  - *Uso típico*: Paredes y fronteras donde la presión no está definida explícitamente, permitiendo que la presión se ajuste de manera natural.
- `totalPressure`: Utilizada en fronteras donde se especifica la presión total (estática + dinámica).
  - *Uso típico*: Salidas de flujo (*outlets*) donde se desea controlar la presión total del flujo que sale del dominio.
- `fixedFluxPressure`: Asegura que el flujo de masa a través de la frontera sea consistente con la condición de velocidad impuesta.
  - *Uso típico*: Fronteras donde se requiere mantener un flujo de masa constante.

En el caso de estudio, se ha optado por la siguiente configuración:

```
wall_inlet_air
{
```

```
    type          zeroGradient;
}
wall_inlet_h2
{
    type          zeroGradient;
}
wall_inlet_premix
{
    type          zeroGradient;
}
wall_inlet_end
{
    type          zeroGradient;
}
wall_cc_inlet
{
    type          zeroGradient;
}
wall_cc
{
    type          zeroGradient;
}
```

La condición de contorno `zeroGradient` se utiliza en las paredes de una cámara de combustión porque permite que el gradiente de presión en la dirección normal a la pared sea cero. Esto refleja una condición en la que la presión se ajusta libremente sin imponer un valor específico, lo que es adecuado para paredes sólidas donde la presión interna del fluido puede variar.

```
outlet
{
    type          totalPressure;
    rho          rho;
    psi          none;
    gamma        1;
    p0           uniform 101325;
    value        uniform 101325;
}
```

La condición de contorno `totalPressure` se usa en la salida de la cámara de combustión. Esta condición permite especificar la presión total (sumando la presión estática y dinámica) del flujo en la salida del dominio. Es útil para modelar la salida a la atmósfera o a una región donde la presión debe ser controlada.

Los valores que toman cada uno de los términos de la condición de `totalPressure` son los siguientes:

- `rho`:  $\rho$

- Denota la densidad del fluido. En este contexto, `rho` se usa para calcular la presión dinámica a partir de la velocidad del flujo.
- `psi`: *none*
  - Representa el potencial de presión. En este caso, se establece en `none`, indicando que no se utiliza un potencial de presión específico.
- `gamma`: *1*
  - El coeficiente adiabático del gas, también conocido como razón de calores específicos ( $C_p/C_v$ ). Se fija en 1, ya que se está haciendo la simplificación de gas ideal.
- `p0`: *uniform 101325*
  - La presión total deseada en la salida, en este caso 101325 Pa (1 atmósfera). Se especifica como un valor uniforme en toda la frontera de salida.
- `value`: *uniform 101325*
  - El valor inicial de la presión en la frontera. Se establece para coincidir con `p0`, asegurando una condición inicial consistente.

En resumen,

- `zeroGradient` en las paredes: Permite que la presión se ajuste libremente sin imponer un valor específico, adecuado para paredes sólidas.
- `totalPressure` en la salida: Permite especificar la presión total del flujo, ideal para salidas abiertas a la atmósfera o donde se requiere control de la presión.

#### 5.2.4. Temperatura

La configuración en el caso de las condiciones de contorno de la temperatura es más sencillo, ya que se ha determinado que todo el contorno tenga la misma condición.

```
wall_inlet_air
{
    type            zeroGradient;
}
wall_inlet_h2
{
    type            zeroGradient;
}
wall_inlet_premix
{
    type            zeroGradient;
}
wall_inlet_end
```

```
{
    type          zeroGradient;
}
wall_cc_inlet
{
    type          zeroGradient;
}
wall_cc
{
    type          zeroGradient;
}
outlet
{
    type          zeroGradient;
}
```

La condición de contorno `zeroGradient` se utiliza en las paredes de una cámara de combustión porque permite que el gradiente de temperatura en la dirección normal a la pared sea libre. Esto refleja una condición en la que la temperatura se ajusta sin imponer un valor específico, lo que es adecuado para paredes sólidas donde la temperatura interna del fluido puede variar.

En la salida, se utiliza `zeroGradient` para permitir que la temperatura se ajuste libremente sin imponer un valor específico.

### 5.2.5. Coeficiente de difusividad turbulenta para la transferencia de calor

En OpenFOAM,  $\alpha_t$  representa la difusividad térmica turbulenta, que es una propiedad clave en la simulación de flujos turbulentos en una cámara de combustión. Las opciones comunes para esta condición de contorno son:

- `compressible::alphatWallFunction`: Se utiliza en paredes para modelar la transferencia de calor turbulenta cerca de la superficie.
  - *Prt*: Número de Prandtl turbulento, que es una constante ajustable.
  - *value*: Valor inicial de  $\alpha_t$ .
- `calculated`: Se utiliza para fronteras donde  $\alpha_t$  se calcula en función de otras condiciones del flujo.

```
wall_inlet_air
{
    type          compressible::alphatWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}
wall_inlet_h2
{
```

```
        type          compressible::alphatWallFunction;
        Prt           0.85;
        value         uniform 0;
    }
    wall_inlet_premix
    {
        type          compressible::alphatWallFunction;
        Prt           0.85;
        value         uniform 0;
    }
    wall_inlet_end
    {
        type          compressible::alphatWallFunction;
        Prt           0.85;
        value         uniform 0;
    }
    wall_cc_inlet
    {
        type          compressible::alphatWallFunction;
        Prt           0.85;
        value         uniform 0;
    }
    wall_cc
    {
        type          compressible::alphatWallFunction;
        Prt           0.85;
        value         uniform 0;
    }
}
```

La condición de contorno `compressible::alphatWallFunction` se utiliza en las paredes de la cámara de combustión para modelar la transferencia de calor turbulenta cerca de la superficie. Se define un valor inicial de  $\alpha_t$  y el número de Prandtl turbulento ( $Prt$ ).

```
outlet
{
    type          calculated;
    value         uniform 0;
}
```

La condición de contorno `calculated` se utiliza en la salida para permitir que  $\alpha_t$  se calcule en función de las otras condiciones del flujo. Esto es apropiado para la salida ya las propiedades del flujo pueden ajustarse dinámicamente.

En resumen:

- `compressible::alphatWallFunction` en las paredes: Modela la transferencia de calor turbulenta cerca de la superficie, adecuado para paredes de la cámara de combustión.

- `calculated` en la salida: Permite que  $\alpha_t$  se calcule en función de otras condiciones del flujo, adecuado para la salida del flujo.

### 5.2.6. Condiciones de Contorno para $\epsilon$ , $k$ , y $\nu_t$

En OpenFOAM,  $\epsilon$  representa la tasa de disipación de energía cinética turbulenta,  $k$  es la energía cinética turbulenta, y  $\nu_t$  es la viscosidad turbulenta. Estas son las condiciones de contorno aplicadas a estas variables de turbulencia:

- `kqRWallFunction` y `epsilonWallFunction`: Utilizadas en paredes para modelar la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación de energía.
  - *value*: Valor inicial de  $k$  o  $\epsilon$ .
- `nutkWallFunction`: Utilizada en paredes para modelar la viscosidad turbulenta.
  - *value*: Valor inicial de  $\nu_t$ .
- `inletOutlet`: Utilizada en la salida para definir condiciones donde las propiedades pueden entrar o salir del dominio.

Para  $k$ :

```
wall_inlet_air
{
    type            kqRWallFunction;
    value           uniform 0.1;
}
wall_inlet_h2
{
    type            kqRWallFunction;
    value           uniform 0.1;
}
wall_inlet_premix
{
    type            kqRWallFunction;
    value           uniform 0.1;
}
wall_inlet_end
{
    type            kqRWallFunction;
    value           uniform 0.1;
}
wall_cc_inlet
{
    type            kqRWallFunction;
    value           uniform 0.1;
}
wall_cc
```

```
{
    type          kqRWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
```

Para  $\epsilon$ :

```
wall_inlet_air
{
    type          epsilonWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
wall_inlet_h2
{
    type          epsilonWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
wall_inlet_premix
{
    type          epsilonWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
wall_inlet_end
{
    type          epsilonWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
wall_cc_inlet
{
    type          epsilonWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
wall_cc
{
    type          epsilonWallFunction;
    value         uniform 0.1;
}
```

Para  $\nu_t$ :

```
wall_inlet_air
{
    type          nutkWallFunction;
    value         uniform 0;
}
wall_inlet_h2
{
    type          nutkWallFunction;
```

```
    value          uniform 0;
}
wall_inlet_premix
{
    type           nutkWallFunction;
    value          uniform 0;
}
wall_inlet_end
{
    type           nutkWallFunction;
    value          uniform 0;
}
wall_cc_inlet
{
    type           nutkWallFunction;
    value          uniform 0;
}
wall_cc
{
    type           nutkWallFunction;
    value          uniform 0;
}
```

Las condiciones de contorno `kqRWallFunction` y `epsilonWallFunction` se utilizan en las paredes de la cámara de combustión para modelar la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación de energía. La `nutkWallFunction` se utiliza para modelar la viscosidad turbulenta.

```
outlet
{
    type           inletOutlet;
    inletValue     uniform 0;
    value          uniform 0;
}
```

La condición de contorno `inletOutlet` se utiliza en la salida de las tres variables por igual para permitir que  $k$ ,  $\epsilon$ , y  $\nu_t$  se ajusten dinámicamente en función de las condiciones del flujo.

En resumen:

- `kqRWallFunction` y `epsilonWallFunction` en las paredes: Modelan la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación de energía cerca de la superficie, adecuados para paredes de la cámara de combustión.
- `nutkWallFunction` en las paredes: Modela la viscosidad turbulenta cerca de la superficie.
- `inletOutlet` en la salida: Permite que  $k$ ,  $\epsilon$ , y  $\nu_t$  se calculen en función de otras condiciones del flujo, adecuado para la salida del flujo.

### 5.3. Condiciones Iniciales

Una vez establecidas las condiciones de contorno, se deben determinar las condiciones iniciales para cada una de las tres entradas al volumen del problema, en los ejemplos detallados en este apartado se va a utilizar el primer caso estudiado, que corresponde con un flujo másico de aire por el premix respecto al flujo de aire por el swirler del 10 %.

Tras observar los primeros datos obtenidos del quemador experimental, se ha decidido realizar las simulaciones utilizando un gasto másico constante de 14.9 kg/h. Este gasto se mantendrá siempre igual, siendo la cantidad de aire que se introduce por el premix respecto al swirler el parámetro a variar.

#### 5.3.1. Velocidad

Se utiliza la condición `flowRateInletVelocity` para las condiciones iniciales de velocidad en el conducto de aire y premezcla, que especifica la velocidad de entrada del flujo basado en un flujo másico conocido.

De esta forma, con los datos de la tabla 5 de las condiciones de contorno del quemador, se pueden calcular los flujos másicos de aire que se introducirán por cada conducto de entrada. Para ello, se hace uso de las fórmulas 5.1 y 5.2.

$$\dot{m}_{\text{aire, premix}} = \dot{m}_{\text{total}} \cdot AP \quad (5.1)$$

$$\dot{m}_{\text{aire, swirler}} = \dot{m}_{\text{total}} \cdot (1 - AP) \quad (5.2)$$

Lo que determina para el caso con AP del 10 % los siguientes flujos másicos de aire:

$\dot{m}_{\text{aire, premix}}$ [kg/s]	$\dot{m}_{\text{aire, swirler}}$ [kg/s]
0.0004139	0.0037250

Tabla 6: Valor del flujo másico de aire para caso AP = 10 %.

Para hacer el cálculo del flujo másico de combustible se hace uso de la ecuación 5.3, cuyo desarrollo viene explicado detenidamente en el anexo 10.

$$\dot{m}_{\text{fuel, premix}} = \frac{\dot{m}_{\text{aire, total}}}{A_{\text{fst}}} \cdot \phi \quad (5.3)$$

Donde el flujo másico total se obtiene mediante la fórmula 5.4.

$$\dot{m}_{\text{aire, total}} = \dot{m}_{\text{aire, premix}} + \dot{m}_{\text{aire, swirler}} \quad (5.4)$$

Siendo finalmente el flujo másico de fuel:

Como la condición de contorno `flowRateInletVelocity` requiere un valor de flujo másico total por el premix, simplemente se añaden todos los flujos másicos que van a introducirse por ese conducto, siguiendo la fórmula 5.5.

$\dot{m}_{\text{fuel, premix}}$ [kg/s]
0.0002167

Tabla 7: Valor del flujo másico de combustible para el caso AP = 10 %.

$$\dot{m}_{\text{total, premix}} = \dot{m}_{\text{aire, premix}} + \dot{m}_{\text{fuel, premix}} \quad (5.5)$$

Por lo tanto los valores a introducir en las condiciones iniciales del fichero de velocidad son las detalladas en la tabla 8.

$\dot{m}_{\text{total, premix}}$ [kg/s]	$\dot{m}_{\text{total, swirler}}$ [kg/s]
0.0006306	0.003725

Tabla 8: Valor del flujo másico total para caso AP = 10 %.

La condición de entrada de velocidad queda definida de la siguiente forma:

```
inlet_premix
{
    type            flowRateInletVelocity;
    massFlowRate    constant 0.0006306;
    rhoInlet        1.2;
    extrapolateProfile 0;
}

inlet_air
{
    type            flowRateInletVelocity;
    massFlowRate    constant 0.003725;
    rhoInlet        1.2;
    extrapolateProfile 0;
}
```

### Parámetros de configuración

- **type**: Define el tipo de condición de entrada. En este caso, `flowRateInletVelocity` se utiliza para especificar la velocidad de entrada basada en un flujo másico conocido.
- **massFlowRate**: Especifica el flujo másico constante de la entrada, en unidades de kg/s.
- **rhoInlet**: Define la densidad del fluido en la entrada, en unidades de kg/m<sup>3</sup>. Aquí, la densidad del fluido es 1.2 kg/m<sup>3</sup>, que es el valor estandar para una entrada que está diseñada para aire o una mezcla con una densidad similar.
- **extrapolateProfile**: Este parámetro determina si el perfil de velocidad debe extrapolarse (1) o no (0). En este caso, está configurado a 0, lo que significa que no se extrapolará el perfil de velocidad.

### Velocidad del fluido

La condición `flowRateInletVelocity` se utiliza para definir la velocidad de entrada de un flujo en términos de un flujo másico conocido y la densidad del fluido. Es especialmente útil en simulaciones donde el flujo másico es una variable controlada o medida experimentalmente, y la velocidad de entrada precisa se puede calcular a partir de estos datos.

La fórmula básica que relaciona el flujo másico ( $\dot{m}$ ), la velocidad de entrada ( $v$ ), el área de la sección transversal ( $A$ ), y la densidad del fluido ( $\rho$ ) es:

$$\dot{m} = \rho Av$$

De esta forma, la velocidad de entrada se puede calcular como:

$$v = \frac{\dot{m}}{\rho A}$$

Donde:

- $\dot{m}$  es el flujo másico (0,0006306 kg/s).
- $\rho$  es la densidad del fluido (1,2 kg/m<sup>3</sup>).
- $A$  es el área de la sección transversal de la entrada.

### Justificación de uso de esta condición

El uso del gasto másico como parámetro de control de las condiciones iniciales es utilizado por el hecho de que en el quemador real se está operando con tres medidores de flujo másico:

- Flujo másico de combustible: mini CORI-FLOW M14.
- Flujo másico de aire por premix: IN-FLOW F-203AI.
- Flujo másico de aire por swirler: IN-FLOW F-203AI.

Estos instrumentos de medida poseen una precisión de  $\pm 0,20\%$  para  $\dot{m}_f$ ,  $\pm 0,58\%$  para  $\dot{m}_{air,premix}$  y  $\pm 2,5\%$  para  $\dot{m}_{air,swirler}$

### Condición inicial para el conducto de hidrógeno

Dado que por el conducto central no se está introduciendo hidrógeno en esta etapa del proceso, se establecerá la condición inicial de la siguiente forma:

```
inlet_h2
{
    type          fixedValue;
    value         uniform (0 0 0);
}
```

### 5.3.2. Presión

En el caso de la configuración de presión en las entradas, la configuración utilizada es la siguiente:

```
inlet_air
{
    type          zeroGradient;
}
inlet_premix
{
    type          zeroGradient;
}
inlet_h2
{
    type          zeroGradient;
}
```

La condición de frontera `zeroGradient` indica que el gradiente de la variable (en este caso, presión) es cero en la frontera. Matemáticamente, esto significa que:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$$

donde  $p$  es la presión y  $n$  es la dirección normal a la frontera.

La condición `zeroGradient` para la presión en las entradas `inlet_air`, `inlet_premix`, y `inlet_h2` significa que la presión no cambia en la dirección normal a estas fronteras. Esta configuración se usa típicamente en escenarios donde:

- **Entrada de Flujo:** El flujo de fluido entra al dominio de simulación sin una presión impuesta específica en la frontera de entrada. En otras palabras, la simulación calcula la presión en estas entradas de manera que no hay un cambio abrupto de presión al cruzar la frontera.
- **Condiciones de Flujo Interno:** Esta condición es adecuada cuando el flujo es impulsado principalmente por condiciones internas del dominio y no por una presión externa fija en la entrada.

#### Justificación de uso

- **Continuidad del Flujo:** Asegura una transición suave del flujo al entrar en el dominio de simulación, lo que es importante para evitar inestabilidades numéricas.
- **Simplicidad en Configuración:** Facilita la configuración de la simulación, especialmente cuando las condiciones exactas de presión en las entradas no son conocidas o no son críticas para el estudio.
- **Comportamiento Natural del Flujo:** Permite que el flujo de entrada sea determinado principalmente por el campo de velocidad y las condiciones de salida, reflejando un comportamiento más natural y realista del sistema.

### 5.3.3. Temperatura

En el caso de la temperatura solo es necesario ajustar los valores deseados en las entradas que se están utilizando, es decir, el `swirler` y el `premix`.

Para las entradas `inlet_air` y `inlet_premix`, se utiliza la condición inicial `fixedValue`, que especifica un valor fijo de temperatura en estas fronteras.

```
inlet_air
{
    type            fixedValue;
    value           uniform 294;
}
inlet_premix
{
    type            fixedValue;
    value           uniform 294;
}
```

- **Condición `fixedValue`:** Esta condición establece un valor constante de temperatura en la frontera. En este caso, las temperaturas se fijan a 294 K para `inlet_air` y `inlet_premix` respectivamente.
- **Razones para Usar `fixedValue`:**
  - **Control Térmico:** Garantiza un control preciso de las condiciones de entrada, lo cual es crucial para estudios de combustión donde la temperatura de entrada puede influir significativamente en la formación y estabilidad de la llama.
  - **Consistencia en la Simulación:** Proporciona valores conocidos y constantes que facilitan la configuración y el análisis de resultados.

Para la entrada `inlet_h2`, se utiliza la condición de frontera `zeroGradient`, que especifica que el gradiente de temperatura es cero en la frontera.

```
inlet_h2
{
    type            zeroGradient;
}
```

- **Condición `zeroGradient`:**

La condición `zeroGradient` para la temperatura en `inlet_h2` implica que no hay un cambio de temperatura en la dirección normal a esta entrada. En otras palabras, la temperatura del fluido que entra no se impone de manera fija, sino que se determina según las condiciones internas del dominio de simulación.
- **Razones para usar `zeroGradient`:**
  - **Adaptabilidad del Flujo:** Permite que la temperatura de la entrada vacía se ajuste de acuerdo con las condiciones internas del flujo, proporcionando una transición más suave y natural.

- **Flexibilidad en Simulaciones:** Es útil cuando no se dispone de datos exactos de la temperatura de entrada o cuando se desea que la simulación determine la temperatura más apropiada basada en el campo de temperatura existente.

#### 5.3.4. Coeficiente de difusividad turbulenta para la transferencia de calor

La difusividad térmica turbulenta, `alphat`, es una propiedad que describe la capacidad del flujo turbulento para transportar calor. Es análoga a la difusividad térmica molecular, pero considera los efectos del transporte turbulento.

Matemáticamente, `alphat` se puede expresar en función del coeficiente de viscosidad turbulenta  $\nu_t$  (`nu_t`) y el número de Prandtl turbulento  $Pr_t$ :

$$\alpha_t = \frac{\nu_t}{Pr_t}$$

donde:

- $\nu_t$  es la viscosidad turbulenta.
- $Pr_t$  es el número de Prandtl turbulento, que generalmente se asume constante en muchas simulaciones (usualmente entre 0.85 y 0.9 para flujos de aire).

Para las entradas de la simulación, se utiliza la configuración:

```
inlet_premix
{
    type          calculated;
}
inlet_air
{
    type          calculated;
}
inlet_h2
{
    type          calculated;
}
```

La condición de frontera `calculated` se usa para indicar que el valor de `alphat` en la frontera no se fija explícitamente, sino que se calcula en función de otras propiedades del flujo que se están resolviendo en la simulación. Esto es especialmente útil en condiciones donde `alphat` depende de la distribución de velocidad y otras variables del campo de flujo.

- **Dependencia del Campo de Flujo:** `alphat` depende de la turbulencia en el flujo, que a su vez depende de las velocidades y propiedades del fluido. Usar `calculated` permite que `alphat` se ajuste dinámicamente durante la simulación.

- **Adaptabilidad:** Esta condición es adecuada para entradas de flujo donde las características turbulentas cambian y no pueden ser determinadas a priori. Permite que la simulación refleje más fielmente las condiciones reales del flujo.
- **Consistencia:** Garantiza que la difusividad térmica turbulenta sea consistente con el modelo de turbulencia utilizado en la simulación, lo cual es crítico para la precisión de los resultados.

### 5.3.5. Condiciones Iniciales para $\epsilon$ , $k$ , y $\nu_t$

Para configurar las condiciones iniciales de turbulencia cada variable utiliza unas funciones distintas, por lo tanto se van a explicar de forma separada.

#### Energía Cinética Turbulenta ( $k$ )

Para las entradas `inlet_air` y `inlet_premix`, se utiliza la condición una condición de frontera llamada `turbulentIntensityKineticEnergyInlet` para  $k$ , que especifica la energía cinética turbulenta en función de la intensidad de turbulencia.

```
inlet_air
{
    type            turbulentIntensityKineticEnergyInlet;
    intensity       0.0471;
    value           uniform 0.801109;
}
inlet_premix
{
    type            turbulentIntensityKineticEnergyInlet;
    intensity       0.0458;
    value           uniform 1.14687;
}
inlet_h2
{
    type            zeroGradient;
}
```

- **Condición `turbulentIntensityKineticEnergyInlet`:** Define la energía cinética turbulenta en términos de una intensidad de turbulencia y una velocidad media de referencia.
  - **intensity:** Proporción de la velocidad media que es turbulenta.
  - **value:** Valor uniforme de  $k$  en la entrada.
- **Condición `zeroGradient` para `inlet_h2`:** No hay cambio de  $k$  en la dirección normal a la entrada.

La intensidad de turbulencia se define como la proporción de la velocidad media que es fluctuante debido a la turbulencia. Valores típicos de la intensidad de turbulencia pueden variar dependiendo del tipo de flujo:

- Para flujos en conductos, una intensidad de turbulencia del 1-5
- En el caso del aire y el flujo premezclado en un quemador, las intensidades elegidas (4.71 % y 4.58 %) se ajustan a este criterio, representando un flujo moderadamente turbulento.

Por otra parte, el valor de  $k$  se calcula mediante la ecuación 5.6.

$$k = \frac{3}{2}(\text{intensity} \cdot U)^2 \quad (5.6)$$

Donde  $U$  es la velocidad media del flujo. Los valores específicos de  $k$  (0.801109 para `inlet_air` y 1.14687 para `inlet_premix`) se han elegido basándose en las características del flujo de entrada y la intensidad de turbulencia.

### Tasa de Disipación de la Energía Cinética Turbulenta ( $\epsilon$ )

Para `inlet_air` y `inlet_premix`, se opta por utilizar comunmente la condición de frontera llamada `turbulentMixingLengthDissipationRateInlet` para  $\epsilon$ , que especifica la tasa de disipación en función de la longitud de mezcla turbulenta.

```
inlet_air
{
    type            turbulentMixingLengthDissipationRateInlet;
    mixingLength    0.019677;
    phi             phi;
    k               k;
    value           uniform 5.98778;
}
inlet_premix
{
    type            turbulentMixingLengthDissipationRateInlet;
    mixingLength    0.000504;
    phi             phi;
    k               k;
    value           uniform 400.429;
}
inlet_h2
{
    type            zeroGradient;
}
```

- **Condición `turbulentMixingLengthDissipationRateInlet`:** Define  $\epsilon$  en términos de una longitud de mezcla y la energía cinética turbulenta.
  - **mixingLength:** Longitud de mezcla turbulenta.
  - **phi:** Variable de flujo volumétrico.
  - **k:** Energía cinética turbulenta.

- **Condición zeroGradient** para `inlet_h2`: No hay cambio de  $\epsilon$  en la dirección normal a la entrada.

Valores elegidos:

- **Longitud de Mezcla Turbulenta (`mixingLength`)**: Es una medida de la escala de la turbulencia en el flujo. Valores típicos de la longitud de mezcla se pueden derivar de las dimensiones geométricas del sistema y la naturaleza del flujo. En este caso, 0.019677 para `inlet_air` y 0.000504 para `inlet_premix` reflejan diferentes escalas de turbulencia en las entradas de aire y mezcla.
- **Valor de  $\epsilon$** : La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta se calcula utilizando la fórmula:

$$\epsilon = C_\mu \frac{k^{3/2}}{L}$$

donde  $C_\mu$  es una constante del modelo (típicamente 0.09) y  $L$  es la longitud de mezcla turbulenta. Los valores de  $\epsilon$  (5.98778 para `inlet_air` y 400.429 para `inlet_premix`) se han derivado de las respectivas longitudes de mezcla y valores de  $k$ .

### Viscosidad Turbulenta ( $\nu_t$ )

Para las tres entradas (`inlet_air`, `inlet_premix` y `inlet_h2`), se utiliza la condición de frontera `calculated` para  $\nu_t$ , que indica que la viscosidad turbulenta se calcula en función de otras variables de flujo.

```
inlet_air
{
    type          calculated;
    value         uniform 0.00964629;
}
inlet_premix
{
    type          calculated;
    value         uniform 0.000295628;
}
inlet_h2
{
    type          calculated;
}
```

- **Condición `calculated`**: La viscosidad turbulenta se calcula basándose en la energía cinética turbulenta  $k$  y la tasa de disipación  $\epsilon$ , generalmente utilizando la relación:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$$

donde  $C_\mu$  es una constante de modelo.

Valores elegidos:

- **Valor de  $\nu_t$ :** La viscosidad turbulenta se calcula basándose en la relación:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$$

donde  $C_\mu$  es típicamente 0.09. Los valores uniformes de  $\nu_t$  se han calculado para asegurar que la viscosidad turbulenta sea coherente con los valores de  $k$  y  $\epsilon$  previamente definidos.

## 5.4. Configuración del Solver

En OpenFOAM, los ficheros `fvSchemes` y `fvSolution` juegan un papel fundamental en la definición de cómo se resolverán las ecuaciones de flujo en la malla computacional. Estos ficheros contienen configuraciones clave que afectan la precisión, estabilidad y eficiencia de las simulaciones.

### Fichero `fvSchemes`

El fichero `fvSchemes` define los esquemas numéricos utilizados para discretizar las ecuaciones diferenciales en el dominio computacional. Estas discretizaciones son esenciales para convertir las ecuaciones continuas en un sistema de ecuaciones algebraicas que se puede resolver numéricamente. Los esquemas en `fvSchemes` se dividen en varias categorías principales:

#### División en Categorías

- **`d2dtSchemes`:** Define los esquemas utilizados para la discretización temporal.
- **`gradSchemes`:** Especifica los esquemas de discretización utilizados para los términos de gradiente.
- **`divSchemes`:** Define los esquemas de discretización para los términos de divergencia, cruciales para los términos convectivos en las ecuaciones de Navier-Stokes.
- **`laplacianSchemes`:** Especifica los esquemas para los términos de Laplaciano, típicamente asociados con la difusión.
- **`interpolationSchemes`:** Define cómo se interpolan las variables desde los centros de las celdas a las caras.
- **`snGradSchemes`:** Especifica los esquemas para los gradientes en la dirección normal a las caras.

**Importancia de `fvSchemes`** La elección de esquemas de discretización afecta la precisión y estabilidad de la simulación. Los esquemas más comunes incluyen:

- **Esquemas de Primer Orden:** Como el esquema `upwind`, que es robusto pero puede introducir difusividad numérica.
- **Esquemas de Segundo Orden:** Como el esquema `linear`, que es más preciso pero puede ser menos estable en flujos altamente convectivos.

**Fichero fvSolution**

El fichero `fvSolution` especifica los parámetros de control de los solvers numéricos y las estrategias de relajación utilizadas para resolver las ecuaciones discretizadas (7). Este fichero está organizado en varias secciones clave:

**Solvers** Define los solucionadores utilizados para cada variable de campo, así como los criterios de tolerancia y las estrategias de corrección.

**PISO, SIMPLE y PIMPLE** Estos son algoritmos específicos para el acoplamiento presión-velocidad en las ecuaciones de Navier-Stokes. Cada uno tiene su propia sección en `fvSolution`.

**Relaxation Factors** Los factores de relajación controlan la estabilidad y la velocidad de convergencia de la solución. Se pueden aplicar a campos discretos y a ecuaciones discretizadas.

**Importancia de fvSolution** La configuración en `fvSolution` es crucial para asegurar que el solver numérico pueda manejar de manera eficiente y estable las ecuaciones del flujo. Los parámetros incluyen:

- **Solvers:** Selección de métodos iterativos apropiados como PCG (Preconditioned Conjugate Gradient) para presión y PBiCG (Preconditioned Bi-Conjugate Gradient) para velocidad.
- **Factores de Relajación:** Controlan la actualización de las variables entre iteraciones para mejorar la estabilidad numérica.

Para el caso a estudiar, estos ficheros se han configurado de la siguiente forma:

**5.4.1. fvSchemes****ddtSchemes**

```
ddtSchemes
{
    default          Euler;
}
```

Se ha elegido el esquema `Euler` para la discretización temporal debido a que para poder desarrollar los cálculos del transitorio hacia una llama estable, es necesario establecer un esquema temporal preciso. Posteriormente se cambiará a `LocalEuler`, optimizando así el coste computacional y la precisión de los resultados.

**gradSchemes**

```
gradSchemes
{
    default          Gauss linear;
}
```

Se ha optado por el esquema `Gauss linear` para la interpolación de los gradientes. Este esquema es de segundo orden y ofrece una buena precisión en la estimación de gradientes en mallas estructuradas y no estructuradas. Esto es esencial en el quemador para capturar los cambios en las propiedades del flujo, como velocidad y temperatura, de manera precisa.

### **divSchemes**

```
divSchemes
{
    default          none;

    div(phi,U)       Gauss GammaV 0.5;
    div(phi,Yi)      Gauss Gamma 0.5;
    div(phi,h)       Gauss Gamma 0.5;
    div(phi,K)       Gauss Gamma 0.5;
    div(phiid,p)     Gauss Gamma 0.5;
    div(phi,epsilon) Gauss upwind;
    div(phi,Yi_h)    Gauss Gamma 0.5;
    div(phi,k)       Gauss upwind;
    div(phi,omega)   Gauss upwind;
    div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))))) Gauss linear;
}
```

La elección de los esquemas de divergencia se ha realizado considerando la naturaleza convectiva y difusiva de cada variable:

- `Gauss Gamma 0.5` para `div(phi,U)`, `div(phi,Yi)`, `div(phi,h)`, `div(phi,K)`, `div(phiid,p)`, `div(phi,Yi_h)`: El esquema `Gamma` con un factor 0.5 es un compromiso entre precisión y estabilidad, combinando características de esquemas de segundo orden y esquemas `upwind`. Esto es crucial para capturar correctamente la mezcla y combustión en el quemador.
- `Gauss upwind` para `div(phi,epsilon)`, `div(phi,k)`, `div(phi,omega)`: El esquema `upwind` es robusto y adecuado para términos turbulentos, garantizando estabilidad en la simulación.
- `Gauss linear` para `div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U))))))`: Un esquema lineal se usa para los términos viscosos, proporcionando una estimación precisa de los esfuerzos viscosos en el flujo.

### **laplacianSchemes**

```
laplacianSchemes
{
    default          Gauss linear limited corrected 0.5;
}
```

El esquema `Gauss linear limited corrected 0.5` se elige para los términos de Laplace, utilizando corrección limitada para mejorar la precisión en mallas no ortogonales. Esto es importante en el quemador, donde la geometría puede inducir no ortogonalidades significativas.

#### **interpolationSchemes**

```
interpolationSchemes
{
    default          linear;
}
```

Se ha seleccionado la interpolación lineal (`linear`) para todas las variables, lo cual es adecuado para mantener un buen nivel de precisión en la estimación de las variables en las caras de las celdas.

#### **snGradSchemes**

```
snGradSchemes
{
    default          limited corrected 0.5;
}
```

El esquema `limited corrected 0.5` se utiliza para los gradientes en la dirección normal a las caras, proporcionando una corrección limitada que mejora la precisión en presencia de mallas no ortogonales, asegurando así que las condiciones de contorno y las propiedades del flujo se resuelvan correctamente.

#### **wallDist**

```
wallDist
{
    method          meshWave;
}
```

El método `meshWave` para calcular la distancia a la pared es adecuado para mallas complejas y no estructuradas, como las que se encuentran en el quemador. Este método garantiza una estimación precisa de la distancia a la pared, que es crucial para los modelos de turbulencia y la predicción de fenómenos de capa límite.

### 5.4.2. fvSolution

#### **Solvers para rho**

```
"rho.*"
{
    solver          diagonal;
}
```

Se utiliza el solver `diagonal` para las densidades (`rho`). Este solver es eficiente y adecuado para resolver ecuaciones diagonales que suelen ser rápidas de resolver. En el contexto del quemador, esto permite una rápida actualización de las densidades, que es fundamental para el cálculo del flujo.

#### Solver para p

```
p
{
    solver          PCG;
    preconditioner  DIC;
    tolerance       1e-6;
    relTol          0.01;
}
```

Para la presión (`p`), se ha elegido el solver `PCG` (Preconditioned Conjugate Gradient) con el preconditionador `DIC` (Diagonal Incomplete Cholesky). Este es un método eficiente y robusto para sistemas simétricos y positivos definidos, lo cual es ideal para las ecuaciones de presión en flujos incompresibles. Los valores de tolerancia y `relTol` aseguran una convergencia precisa y eficiente.

#### Solver para pFinal

```
pFinal
{
    $p;
    relTol          0;
}
```

`pFinal` utiliza la configuración de `p` con una tolerancia relativa cero para asegurar una solución precisa en el último paso de iteración.

#### Solvers para U, h, k, epsilon, omega

```
"(U|h|k|epsilon|omega)"
{
    solver          PBiCGStab;
    preconditioner  DILU;
    tolerance       1e-6;
    relTol          0.1;
}
```

Para las variables de velocidad (`U`), entalpía (`h`), energía cinética turbulenta (`k`), disipación de energía turbulenta (`epsilon`) y frecuencia específica de disipación (`omega`), se utiliza el solver `PBiCGStab` (Preconditioned Bi-Conjugate Gradient Stabilized) con el preconditionador `DILU` (Diagonal Incomplete LU). Este método es adecuado para sistemas asimétricos y no definidos positivamente, que son comunes en flujos turbulentos y de combustión. Las tolerancias garantizan un equilibrio entre precisión y eficiencia computacional.

#### Solvers para Yi

```
"Yi.*"  
{  
    $hFinal;  
}
```

Para las fracciones de especies ( $Y_i$ ), se utiliza la configuración de `hFinal` para asegurar una solución precisa en el último paso de iteración.

### Solvers para G

```
"G.*"  
{  
    solver          PCG;  
    preconditioner  DIC;  
    tolerance       1e-5;  
    relTol          0.1;  
}
```

Para G, se utiliza el solver PCG con el preconditionador DIC, adecuado para sistemas simétricos y positivos definidos. La tolerancia y `relTol` aseguran una solución eficiente y precisa.

### PIMPLE

```
PIMPLE  
{  
    momentumPredictor  yes;  
    nOuterCorrectors   1;  
    nCorrectors        2;  
    nNonOrthogonalCorrectors 2;  
    maxDeltaT 0.01;  
    maxCo           0.5;  
    alphaTemp       0.05;  
    alphaY          0.05;  
    Yref  
    {  
        O2           0.1;  
        CH4          0.1;  
    }  
    rDeltaTSmoothingCoeff 0.025;  
    rDeltaTDampingCoeff  1;  
}
```

El algoritmo PIMPLE combina las características de los algoritmos PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) y SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations), adecuado para flujos transitorios y estacionarios. Las configuraciones específicas son:

- `momentumPredictor`: Activado para mejorar la predicción del campo de velocidad.

- `nOuterCorrectors`: Un corrector externo.
- `nCorrectors`: Dos correctores internos para cada paso de tiempo.
- `nNonOrthogonalCorrectors`: Dos correctores para manejar no ortogonalidades en la malla.
- `maxDeltaT` y `maxCo`: Limitan el tamaño del paso de tiempo y el número de Courant para asegurar la estabilidad de la simulación.
- `alphaTemp` y `alphaY`: Factores de relajación para temperatura y especies químicas.
- `Yref`: Valores de referencia para la fracción de oxígeno (O2) y metano (CH4).
- `rDeltaTSmoothingCoeff` y `rDeltaTDampingCoeff`: Coeficientes para el suavizado y amortiguación del cambio del paso de tiempo.

### **relaxationFactors**

```
relaxationFactors
{
    equations
    {
        ".*"          0.8;
    }
}
```

Los factores de relajación se aplican a todas las ecuaciones con un valor de 0.8. Esto ayuda a estabilizar la solución numérica reduciendo las oscilaciones y mejorando la convergencia.

## **5.5. Configuración de la Química y la Combsustión**

En simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD) que involucran procesos de combustión, como las que se realizan con el solver `reactingFoam` de OpenFOAM, es crucial definir adecuadamente las propiedades químicas y los parámetros de combustión. Los ficheros `chemistryProperties` y `combustionProperties` contienen esta información esencial.

### **5.5.1. Fichero `chemistryProperties`**

El fichero `chemistryProperties` define las propiedades y parámetros relacionados con las reacciones químicas que ocurren en la simulación. Este fichero incluye información como el modelo cinético, los parámetros de activación, y las especies químicas involucradas. A continuación, se describen las secciones típicas de este fichero y su relevancia:

**Modelo Cinético** El modelo cinético define cómo se calculan las tasas de reacción. Los modelos pueden variar desde mecanismos simples hasta complejos dependiendo de la precisión requerida y la disponibilidad de datos. Los modelos cinéticos comunes incluyen:

- **Arrhenius:** Utiliza la ecuación de Arrhenius para calcular las tasas de reacción en función de la temperatura y los parámetros de activación.
- **EDC (Eddy Dissipation Concept):** Modelo basado en la teoría de mezcla turbulenta.

En el caso de estudio, se ha elegido el modelo DRM19 para computar las reacciones químicas, el cual incluye un total de 21 especies y 84 reacciones químicas diferentes.

**Parámetros de Activación** Estos parámetros definen las constantes de reacción y la energía de activación para cada especie química. Son cruciales para determinar la velocidad y la extensión de las reacciones químicas en la simulación.

**Especies Químicas** Se define una lista de especies químicas que participan en las reacciones. Cada especie tiene propiedades como el peso molecular, capacidad calorífica y entalpía de formación.

El fichero de configuración utilizado en este estudio es el siguiente:

```
#includeEtc "caseDicts/solvers/chemistry/TDAC/chemistryPropertiesFlame.cfg"

chemistryType
{
    solver          ode;
    method          TDAC;
}

chemistry          on;

initialChemicalTimeStep 1e-7;

odeCoeffs
{
    solver          seulex;
    absTol          1e-8;
    relTol          1e-1;
}

importantSpecies
{
    CO2;
    H2O;
    CH4;
    O2;
}

reduction
{
    tolerance       1e-4;
}
```

```
tabulation
{
    tolerance    3e-3;
}

#include "reactionsGRI"
```

La primera línea incluye una configuración predefinida para las propiedades químicas de la llama desde un archivo de configuración estándar. Esta inclusión asegura que se utilicen parámetros y configuraciones optimizadas para la simulación de llamas.

### **chemistryType**

Esta sección define el tipo de solver químico y el método a utilizar.

- **solver ode**: Especifica que se utilizará un solver basado en ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE).
- **method TDAC**: Indica que se empleará el método de *Tabulation of Dynamic Adaptive Chemistry* (TDAC). Este método es eficiente para reducir el tiempo de cálculo en simulaciones químicas complejas al adaptarse dinámicamente a las condiciones locales.

### **initialChemicalTimeStep**

Define el tamaño del paso de tiempo inicial para los cálculos químicos. Un paso de tiempo pequeño ( $1e-7$ ) es necesario para capturar con precisión las rápidas tasas de reacción al inicio de la simulación.

### **odeCoeffs**

Esta sección especifica los coeficientes y parámetros para el solver ODE.

- **solver seulex**: Especifica que se utilizará el solver **seulex**, que es un solver eficiente y robusto para resolver sistemas rígidos de ODEs.
- **absTol 1e-8**: Define la tolerancia absoluta para el solver, indicando la precisión requerida en los cálculos.
- **relTol 1e-1**: Define la tolerancia relativa para el solver, permitiendo errores relativos más grandes en las soluciones.

### **importantSpecies**

Especifica las especies químicas importantes que deben ser monitorizadas con mayor precisión durante la simulación. Estas especies son fundamentales para la caracterización de la combustión y la generación de productos.

### **reduction**

Define la tolerancia para la reducción del mecanismo químico. Una tolerancia de  $1e-4$  indica el umbral por debajo del cual las especies y reacciones pueden ser consideradas menos significativas y, por lo tanto, simplificadas en el modelo.

### tabulation

Define la tolerancia para la tabulación química. Una tolerancia de  $3e-3$  se utiliza para controlar la precisión de las tablas generadas para el método TDAC, balanceando la exactitud y la eficiencia computacional.

```
#include reactionsGRI"
```

Esta línea incluye un archivo externo que contiene las reacciones del mecanismo GRI (Gas Research Institute). El mecanismo GRI es ampliamente utilizado para la simulación de la combustión de metano y otros hidrocarburos ligeros.

### 5.5.2. Fichero combustionProperties

El fichero `combustionProperties` define las propiedades y parámetros relacionados con el proceso de combustión. Este fichero incluye información sobre el modelo de combustión, las condiciones de referencia y los parámetros de mezcla. A continuación, se describen las secciones típicas de este fichero y su relevancia:

**Modelo de Combustión** El modelo de combustión define el enfoque utilizado para simular el proceso de combustión. Los modelos comunes incluyen:

- **Eddy Dissipation Concept (EDC):** Combina la química detallada y los efectos de la turbulencia, donde las reacciones químicas ocurren en pequeños subvolúmenes llamados "fine structures" que son generados por la turbulencia y se disipan a través de interacciones turbulentas, permitiendo una representación más precisa de las tasas de reacción en flujos turbulentos.
- **Partially Stirred Reactor (PaSR):** Modelo que considera tanto la mezcla como la cinética química.
- **Laminar:** Modelo de combustión laminar, utilizado en situaciones donde la combustión ocurre en un régimen de flujo laminar.

**Parámetros de Mezcla** Define las fracciones de mezcla iniciales y las razones de equivalencia. Estos parámetros son cruciales para establecer las condiciones iniciales y de frontera de la simulación.

### Modelo de combustión utilizado

Para el caso transitorio en el que partiendo de un estado estacionario de flujo no reactivo se pretende añadir un punto de calor para encender la mezcla y comenzar todo el proceso de combustión, es necesario partir de un modelo de combustión que no sea demasiado complejo para optimizar el tiempo de cálculo.

De esta forma, una vez conseguido encender la llama en el volumen de control, se cambiará del modelo de combustión laminar a un modelo EDC partiendo de un estado mucho más estable, optimizando así precisión y gasto computacional al mismo tiempo.

Por ello, el modelo de combustión utilizado para el transitorio es el siguiente:

```
combustionModel laminar;
```

La configuración del fichero `combustionProperties` con el modelo `laminar` es adecuada para comenzar la simulación despreciando la interacción entre la química y la turbulencia. Esta elección simplifica los cálculos, siendo una herramienta valiosa para estudiar el comportamiento fundamental de la llama. Sin embargo, en el contexto del estudio, es necesario profundizar más para lograr un modelo de utilidad que muestre resultados del quemador real.

## 5.6. Inicialización del transitorio

Una vez configurados todos los parámetros necesarios, se tiene que iniciar la combustión mediante la creación de una fuente de calor localizada en un punto donde la mezcla tenga las condiciones necesarias para iniciar la combustión.

Para encontrar dicho punto, es de utilidad encontrar mediante el software de `paraView` la zona de dosado estequiométrico.

El caso de partida se puede describir como una simulación con la química desactivada, donde se introducen aire y una premezcla de metano y aire por distintos conductos y se mezclan justo antes de entrar a la cámara de combustión.

Para tener una visualización gráfica de la velocidad del flujo en este estado de partida, se puede observar la figura 5.

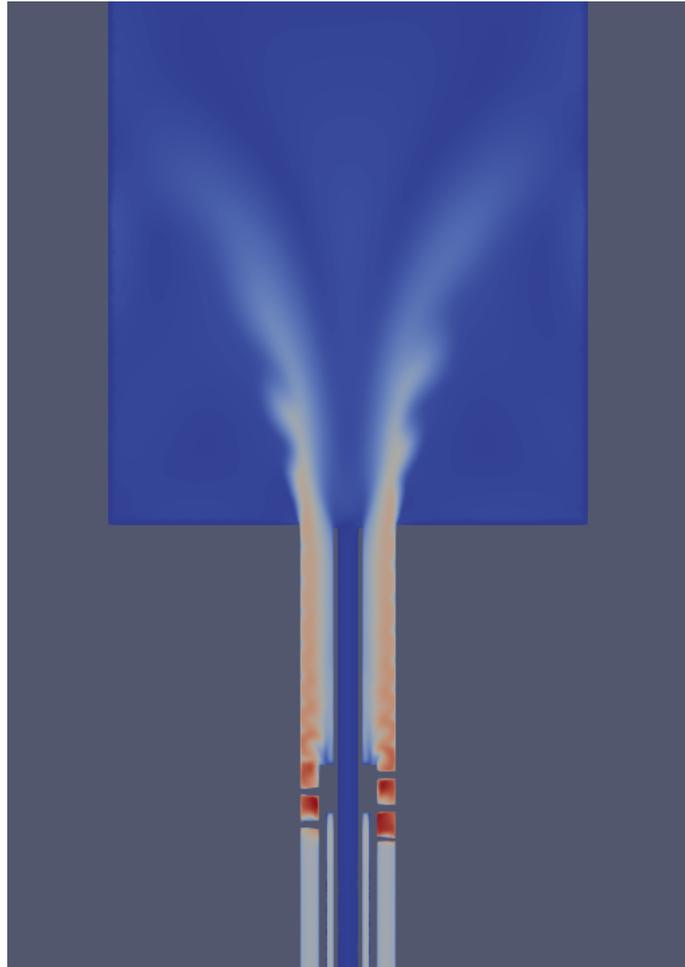


Figura 5: Estado del campo de velocidades antes de iniciar la combustión.

En esta figura se aprecia muy bien el efecto que tiene el swirler sobre el fluido, aumentando la turbulencia y consecuentemente la mezcla entre el flujo premezclado y el aire puro. A su vez, también se observa como el flujo que entra por el premix tiene mayor velocidad en el eje Z, esto es por ser un conducto tan pequeño en comparación con el de aire puro.

Y por otro lado, se tiene la figura 6, donde se observa la fracción másica de metano en cada punto.

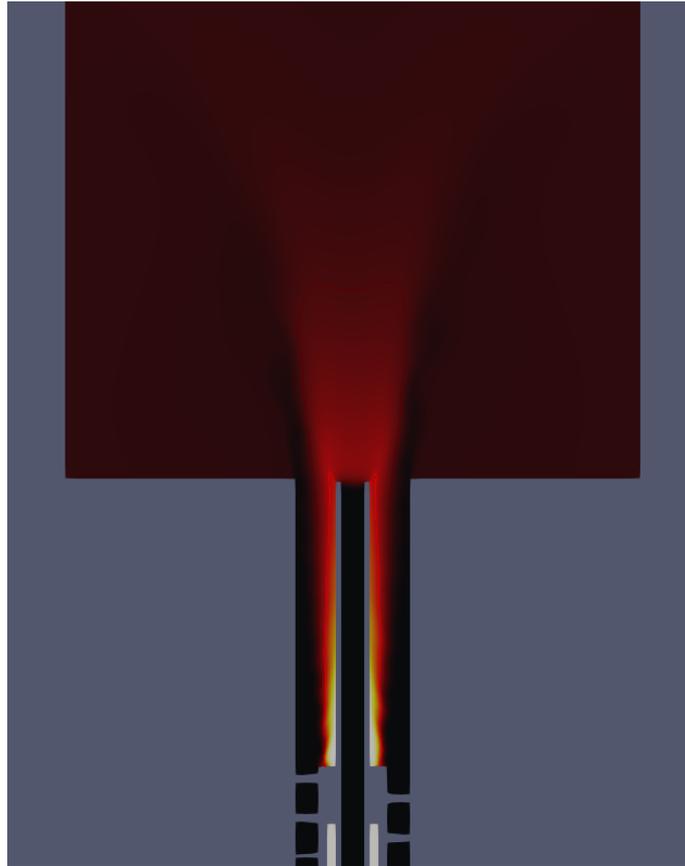


Figura 6: Estado del campo de fracciones de CH4 antes de iniciar la combustión.

Donde se observa claramente como todo el metano viene introducido desde el conducto del premix, y se empieza a disipar junto al aire a partir del punto donde conectan ambas entradas. De esta forma, se genera un cono de la concentración de metano a la entrada de la cámara de combustión.

Para encontrar el punto donde el dosado estequiométrico es el deseado y las condiciones son óptimas para encender la mezcla, se hace uso de la relación de equivalencia,  $\phi$ , que es la relación entre la mezcla real de combustible-aire y la mezcla estequiométrica. Para calcular  $\phi$ , se hace uso de los campos de concentración de especies, metano ( $\text{CH}_4$ ) y el oxígeno ( $\text{O}_2$ ).

El dosado relativo se define como:

$$\phi = \frac{\left(\frac{\text{CH}_4}{\text{O}_2}\right)_{\text{real}}}{\left(\frac{\text{CH}_4}{\text{O}_2}\right)_{\text{st}}} \quad (5.7)$$

Donde  $\left(\frac{\text{CH}_4}{\text{O}_2}\right)_{\text{st}} = \frac{1}{2}$  para metano.

Una vez configurado en ParaView, se obtiene el campo de dosado relativo mostrado en la figura 7.

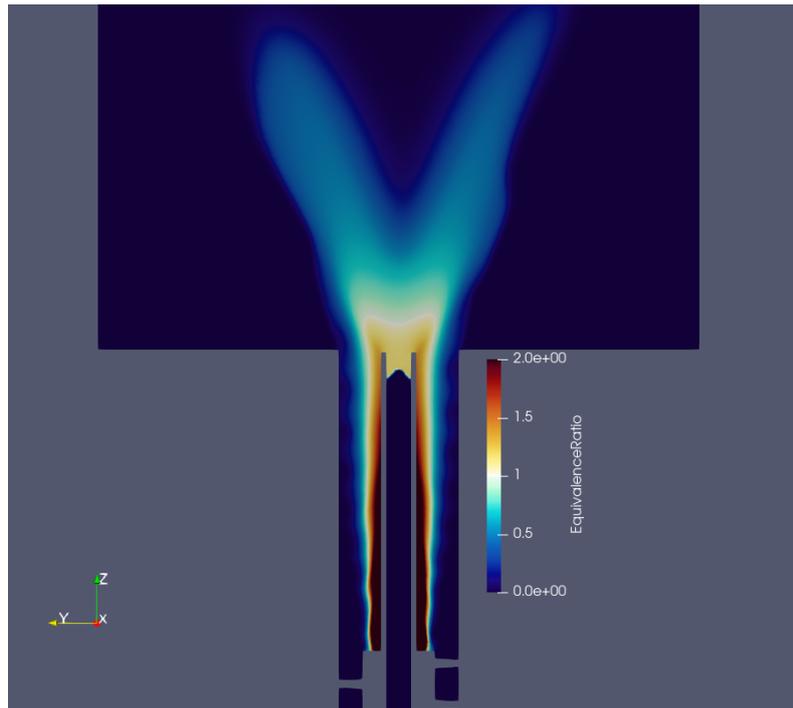


Figura 7: Estado del campo de dosado relativo antes de iniciar la combustión.

En la figura 7 se puede observar la zona de dosado estequiométrico si se busca la línea blanca, que corresponde geoméricamente con un punto poco después de la entrada a la cámara de combustión.

Una vez determinado dicho punto, hay que crear la zona de calor localizada. Esto se puede lograr configurando el archivo `setFieldsDict` para definir una región específica en la que se introducirá una alta temperatura o una fracción de especies de combustible.

### 5.6.1. Configuración del archivo `setFieldsDict`

El archivo `setFieldsDict` especifica las regiones y los valores iniciales que se asignarán a esas regiones. A continuación, se muestra el archivo de configuración para crear una región de alta temperatura centrada en  $(0, 0, 0,175)$  con un lado de  $0,005$ .

#### Valores por Defecto

Primero, se establecen los valores por defecto para todo el dominio en la sección denominada `defaultFieldValues`:

```
defaultFieldValues
(
  volScalarFieldValue T 300
  volScalarFieldValue CH4 0.0
);
```

En este caso, se define una temperatura ambiente de 300 K y una fracción de metano de 0.0.

### Definición de la Región de Ignición

A continuación, se define la región de ignición en la sección `regions`:

```
regions
(
  boxToCell
  {
    box (-0.0025 -0.0025 0.1725) (0.0025 0.0025 0.1775);
    fieldValues
    (
      volScalarFieldValue T 1500
    );
  }
);
```

En esta configuración:

- `box` define una caja centrada en  $(0, 0, 0,175)$  con un lado de  $0,005$ , extendiéndose desde  $(-0,0025, -0,0025, 0,1725)$  hasta  $(0,0025, 0,0025, 0,1775)$ , unidades en metros.
- `fieldValues` establece una alta temperatura de  $1500$  K en la región definida.

### Aplicación de los Valores Iniciales

Para aplicar los valores iniciales definidos en `setFieldsDict`, se debe ejecutar el siguiente comando en el directorio del caso:

```
setFields
```

Este comando asignará los valores especificados a la región definida en el dominio de simulación.

### Ejecución de la Simulación

Una vez configurados los campos iniciales, se puede proceder a ejecutar la simulación con `reactingFoam`.

Tras lanzar esta primera simulación, se puede observar el punto de calor inicial, que queda definido en la figura 8.

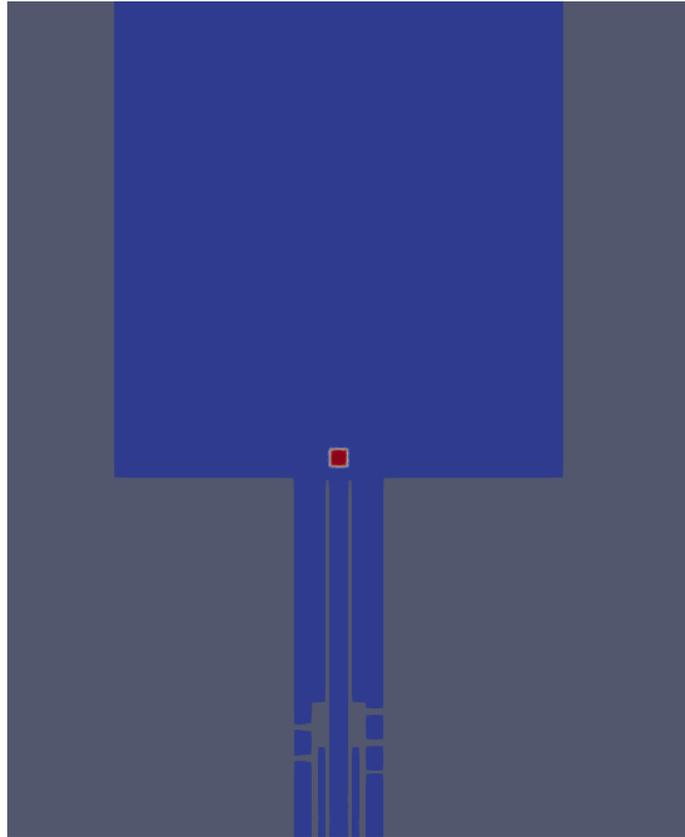


Figura 8: Estado del campo de temperatura antes de iniciar la combustión.

Donde se puede apreciar el punto de calor en la zona que previamente se ha identificado como óptima para el encendido.

## 6. Convergencia a la solución de la simulación

Una vez que se ha logrado generar una llama a partir de las condiciones previamente configuradas, se debe tener en cuenta que la simulación, aunque convergida, no ha sido configurada para obtener valores reales.

Esto debido a:

- **Un modelo de combustión simplificado:**

El modelo de combustión laminar no genera resultados precisos.

- **Un esquema de solver temporal muy costoso:**

El modelo euler para resolver los esquemas temporales es muy costoso computacionalmente para una malla tan grande, lo que implica tener pocos resultados en mucho tiempo, por ello es necesario hacer un cambio en este esquema.

Una vez que la llama es estable, se van a realizar cambios en el modelo de combustión y el esquema temporal para mejorar la precisión y la eficiencia de la simulación. A continuación, se explica el porqué de estos cambios, las configuraciones necesarias y cómo mejoran la simulación.

### 6.1. Cambio del Modelo de Combustión: De Laminar a EDC

#### 6.1.1. Motivación

El modelo de combustión laminar es adecuado para simular llamas con flujo laminar y bajas tasas de turbulencia. Sin embargo, en aplicaciones prácticas, como en quemadores industriales, las llamas suelen ser turbulentas. Para capturar mejor los efectos de la turbulencia en la combustión, se utiliza el modelo Eddy Dissipation Concept (EDC).

#### 6.1.2. Configuración

Para cambiar de un modelo laminar a un modelo EDC en OpenFOAM, es necesario modificar el archivo `combustionProperties`. A continuación se muestra la configuración para el modelo EDC:

```
combustionModel EDC;

EDCCoeffs
{
    version v2005;
}
```

### 6.1.3. Mejora de la Simulación

El modelo EDC considera los efectos de la turbulencia en la tasa de reacción química, lo que permite una simulación más realista de la combustión en flujos turbulentos. Este modelo captura mejor las fluctuaciones de la mezcla y la liberación de calor, proporcionando resultados más precisos en términos de temperatura, especies químicas y emisiones.

## 6.2. Cambio del Esquema Temporal: De Euler a localEuler

### 6.2.1. Motivación

El esquema temporal Euler explícito es simple y eficiente, pero puede no ser adecuado para simulaciones con grandes variaciones temporales en la combustión, especialmente cuando se utilizan modelos de combustión complejos como el EDC. En estos casos, se recomienda el uso de esquemas temporales adaptativos, como `localEuler`.

### 6.2.2. Configuración

Para cambiar el esquema temporal de `Euler` a `localEuler` en OpenFOAM, se modifica el archivo `fvSchemes` en la sección `ddtSchemes`. A continuación se muestra la configuración:

```
ddtSchemes
{
    default          localEuler;
}
```

### 6.2.3. Mejora de la Simulación

El esquema `localEuler` permite una adaptación local del paso de tiempo basado en las condiciones locales del flujo. Esto mejora la estabilidad numérica y la precisión de la simulación, especialmente en regiones con altas tasas de reacción o grandes gradientes de temperatura. El uso de un esquema temporal adaptativo es crucial para capturar correctamente las dinámicas de la combustión y evitar errores numéricos.

## 6.3. Criterios de convergencia

Una vez configurado el caso, se estudia la convergencia de la simulación mediante los siguientes métodos:

### 6.3.1. Residuales

En cualquier simulación de CFD, uno de los métodos más utilizados para comprobar la convergencia de la solución es evaluar los resultados a través de los residuales. Los residuales son una medida del error en las ecuaciones discretizadas que se están resolviendo. A medida

que la solución avanza en el tiempo o en las iteraciones, los residuales deberían disminuir si la simulación se está acercando a una solución estable (5).

### **Criterios Generales de Convergencia**

Para considerar que una simulación ha convergido, los residuales deben cumplir con ciertos criterios:

- **Residuales Absolutos:** Los residuales deben disminuir por debajo de un umbral predefinido, como  $10^{-6}$  o  $10^{-7}$  (5).
- **Residuales Relativos:** Los residuales deben disminuir en varios órdenes de magnitud desde su valor inicial, típicamente en al menos tres órdenes de magnitud.
- **Continuidad:** Los errores de continuidad, que indican la conservación de masa, deben ser mínimos.
- **Comportamiento Estable:** Los valores de las variables clave (velocidad, presión, temperatura, etc.) deben estabilizarse y no presentar oscilaciones significativas.

### **Análisis de la Convergencia de la Simulación**

Para la simulación del quemador utilizando `reactingFoam`, los residuales obtenidos en la última iteración de la simulación son los siguientes:

Variable	Initial Residual	Final Residual	No Iterations
$\rho$	0	0	0
$U_x$	5.14944e-05	3.4869e-07	1
$U_y$	4.96973e-05	5.88006e-07	1
$U_z$	4.83704e-05	1.66456e-07	1
H2	6.28242e-05	2.23675e-07	1
H	0.000100569	3.52337e-07	1
O	0.000108159	3.25011e-07	1
O2	9.41329e-06	3.01341e-07	1
OH	4.89728e-05	1.66808e-07	1
H2O	8.03267e-06	2.78083e-07	1
HO2	0.000379366	2.09409e-07	2
CH2	0.00070473	5.00686e-07	2
CH2(S)	0.000687759	4.64554e-07	2
CH3	0.000353713	1.25149e-07	2
CH4	1.76875e-05	3.45521e-07	1
CO	6.68171e-05	2.17196e-07	1
CO2	7.9895e-06	2.87897e-07	1
HCO	0.00056874	1.89082e-07	2
CH2O	0.000147388	6.91719e-07	1
CH3O	0.000482202	2.6997e-07	2
C2H4	0.000222646	7.17582e-07	1
C2H5	0.000448749	1.34899e-07	2
C2H6	0.000164618	7.11457e-07	1
h	7.83033e-06	2.68231e-07	1
p	0.00175055	1.71277e-05	28
p	0.000495826	4.83307e-06	54
p	0.000147761	1.46781e-06	46
$\rho$	0	0	0
time step continuity errors:	sum local = 9.1514e-09	global = -5.94247e-09	
p	0.000184178	1.63495e-06	19
p	8.20845e-05	9.95179e-07	14
p	3.855e-05	8.52204e-07	11
$\epsilon$	2.89313e-05	1.62944e-07	1
k	3.96593e-05	9.2791e-07	1

Tabla 9: Tabla de Residuales y Número de Iteraciones para Diferentes Variables

### Interpretación de los Residuales

Cada uno de los residuales finales para las variables clave cae por debajo de  $10^{-6}$ , lo que indica una alta precisión en las soluciones obtenidas. A continuación, se detalla la convergencia de cada variable:

- **Densidad ( $\rho$ ):** Residual inicial y final igual a 0, indicando una solución estable y precisa.
- **Velocidades ( $U_x, U_y, U_z$ ):** Los residuales iniciales son del orden de  $10^{-5}$ , y los residuales finales caen por debajo de  $10^{-6}$ , con solo una iteración necesaria para alcanzar la convergencia.

- **Especies Químicas** ( $H_2, H, O, O_2, OH, H_2O, HO_2, CH_2, CH_2(S), CH_3\dots$ ): Los residuales finales de todas las especies químicas son menores a  $10^{-6}$ , con pocas iteraciones, lo que indica una simulación precisa y estable.
- **Presión (p)**: Aunque los residuales iniciales son mayores, en el orden de  $10^{-3}$  a  $10^{-4}$ , los residuales finales se reducen a  $10^{-6}$  con un número moderado de iteraciones.
- **Energía (h), Turbulencia ( $\epsilon, k$ )**: Los residuales finales caen por debajo de  $10^{-6}$ , mostrando convergencia estable.
- **Errores de Continuidad**: Los errores locales y globales son del orden de  $10^{-9}$ , indicando una buena conservación de masa.

### Análisis de los Residuales

Dado que todos los residuales finales para las variables clave están por debajo de  $10^{-6}$  y los errores de continuidad son mínimos, se puede concluir que la simulación ha alcanzado la convergencia. Los resultados son precisos y estables, lo cual es indicativo de una simulación bien resuelta para el quemador en estudio.

#### 6.3.2. Variación de flujo másico

Además del análisis de los residuales de las ecuaciones discretizadas, otro criterio crucial para evaluar la convergencia es la comparación del gasto (caudal) entre las condiciones de entrada y salida del dominio de simulación. Este criterio es especialmente importante en aplicaciones donde la conservación de masa es fundamental, como en la simulación de quemadores o sistemas de flujo reactivo.

#### Definición del Criterio de Convergencia por Gasto

El criterio de convergencia basado en la diferencia de gasto entre entrada y salida se fundamenta en la ley de conservación de masa, que establece que, en un sistema cerrado y en estado estacionario, el caudal de masa que entra al sistema debe ser igual al caudal de masa que sale del sistema. La diferencia relativa entre el gasto de entrada y el de salida debe ser lo suficientemente pequeña para considerar que la simulación ha alcanzado una solución convergente.

Matemáticamente, la diferencia relativa de gasto se puede expresar como:

$$\text{Error relativo} = \frac{|\dot{m}_{\text{entrada}} - \dot{m}_{\text{salida}}|}{\dot{m}_{\text{entrada}}} \quad (6.1)$$

donde  $\dot{m}_{\text{entrada}}$  y  $\dot{m}_{\text{salida}}$  son los caudales másicos en la entrada y salida del dominio, respectivamente.

#### Evolución de la Convergencia del Gasto

Para tener una representación visual de la diferencia de gasto másico en las últimas iteraciones de la simulación, se han extraído los valores en la figura 9.

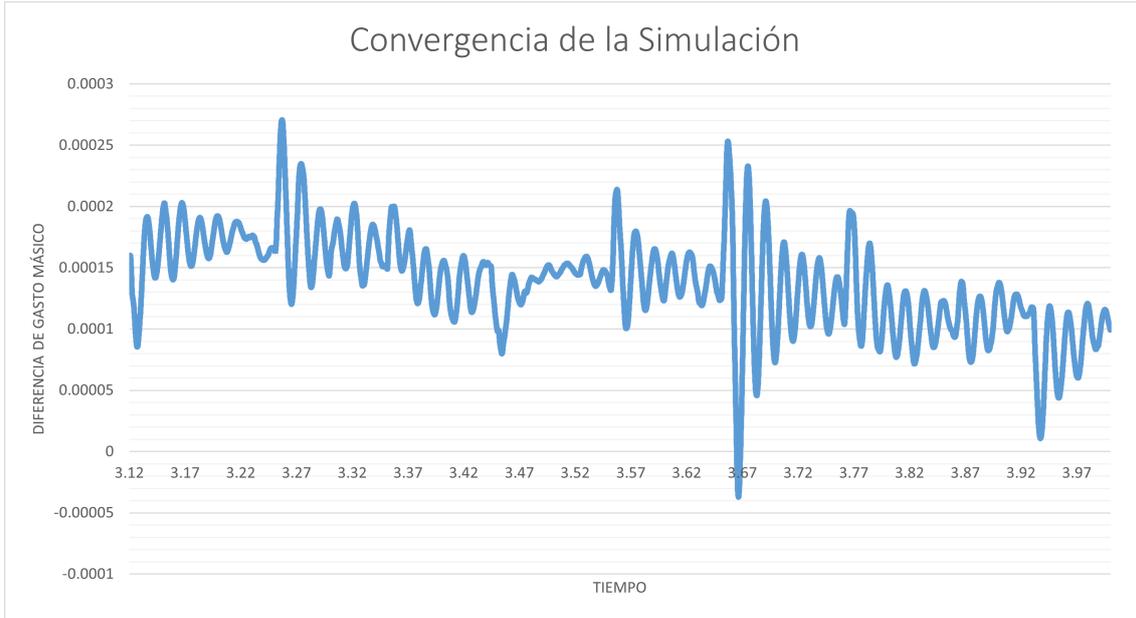


Figura 9: Evolución de la diferencia de gasto másico hasta la convergencia en las últimas iteraciones de la simulación.

### Convergencia en la Simulación del Quemador

Para obtener el gasto másico de entrada, se suman los gastos de aire por ambos conductos y el de combustible, como se observa en la ecuación 6.3.

$$\dot{m}_{\text{aire, premix}} + \dot{m}_{\text{aire, swirler}} + \dot{m}_{\text{fuel, premix}} = \dot{m}_{\text{total}} \quad (6.2)$$

$$0,0004139 + 0,003725 + 0,0002167 = 0,0043556[\text{kg/s}] \quad (6.3)$$

Si se extrae el gasto en la última iteración y se realiza la diferencia, se obtiene la tabla 10.

$\dot{m}_{\text{inlet}} [\text{kg/s}]$	$\dot{m}_{\text{outlet}} [\text{kg/s}]$	$\Delta\dot{m} [\text{kg/s}]$
0.0043556	0.0042555	0.0001001

Tabla 10: Valor del flujo másico de aire para caso AP = 10%.

En la simulación del quemador utilizando `reactingFoam`, se ha observado lo siguiente:

- **Gasto de Entrada:**  $\dot{m}_{\text{entrada}} = 4,35 \times 10^{-3}$
- **Diferencia entre Gasto de Entrada y Salida:**  $\Delta\dot{m} = 1,001 \times 10^{-4}$

Para evaluar la convergencia de la simulación, calculamos el error relativo:

$$\text{Error relativo} = \frac{1,001 \times 10^{-4}}{4,35 \times 10^{-3}} \approx 0,023 \quad (2,3\%) \quad (6.4)$$

Un error relativo del 2.3 % es generalmente aceptable en muchas simulaciones de CFD, especialmente en contextos de flujo reactivo y combustión, donde las fluctuaciones pequeñas son esperables debido a la naturaleza compleja y no lineal de los procesos involucrados.

### **Análisis de la Convergencia**

La diferencia de gasto entre la entrada y la salida es un indicador importante de la convergencia en simulaciones de dinámica de fluidos. En este caso, con un error relativo del 2.3 %, se puede concluir que la simulación ha alcanzado una convergencia aceptable. Esto se justifica por el hecho de que la diferencia es relativamente pequeña en comparación con el caudal de entrada, indicando que la conservación de masa se ha mantenido de manera precisa, lo que es crucial para la validez de los resultados de la simulación del quemador.

## 7. Resultados para la condición de operación nominal

La simulación del quemador proporciona una gran cantidad de datos que pueden ser analizados para obtener información detallada sobre el comportamiento del flujo, la combustión y la transferencia de calor. Para analizar estos resultados, se utiliza Paraview, una herramienta de visualización de datos que permite explorar y comprender los resultados de las simulaciones.

### 7.1. Comparación Esquemas de primer y segundo orden

Para la simulación del quemador se ha optado por utilizar para las variables principales del problema un esquema Gamma 0.5.

El esquema Gamma 0.5 es una técnica de interpolación numérica usada en la discretización de ecuaciones diferenciales parciales. Este esquema es una forma específica del esquema de TVD (Total Variation Diminishing), que busca mantener la variación total de la solución bajo control, evitando oscilaciones no físicas.

Los esquemas TVD son diseñados para evitar las oscilaciones numéricas que pueden aparecer en la solución de ecuaciones de convección-difusión cuando se usan métodos de alta resolución. El esquema Gamma es una forma particular de estos métodos, y la elección del parámetro Gamma afecta cómo se mezclan los esquemas de primer y segundo orden.

El parámetro  $\gamma$  en los esquemas TVD es un valor que varía entre 0 y 1. Determina el peso que se da a los esquemas de primer y segundo orden en la interpolación. Un  $\gamma$  de 0.5 significa que el esquema es una mezcla equilibrada entre primer orden (menos preciso pero más estable) y segundo orden (más preciso pero potencialmente menos estable).

La explicación de este parámetro viene más detallada en el documento (21).

Este valor de 0.5 se ha determinado tras hacer un estudio comparativo entre la solución utilizando esquemas de primer orden (Upwind) y esquemas de segundo orden  $\gamma = 0,5$ .

Los resultados de ambas simulaciones se analizarán y compararán en términos de:

- Distribución de temperatura
- Concentración de OH
- Valor de  $\dot{Q}$

#### 7.1.1. Metodología

Las simulaciones se llevaron a cabo utilizando el mismo modelo de quemador, cambiando únicamente los esquemas numéricos. Los detalles específicos de cada esquema son:

- **Simulación 1:** Esquemas de segundo orden con  $\gamma = 0,5$
- **Simulación 2:** Esquemas de primer orden *upwind*

Los resultados han sido extraídos y comparados utilizando ParaView.

### 7.1.2. Resultados

A continuación, se presentan las comparaciones visuales de las distribuciones de temperatura,  $OH$ ,  $OH \cdot CH_2O$  y  $Q_{dot}$  para ambas simulaciones.

#### Distribución de Temperatura

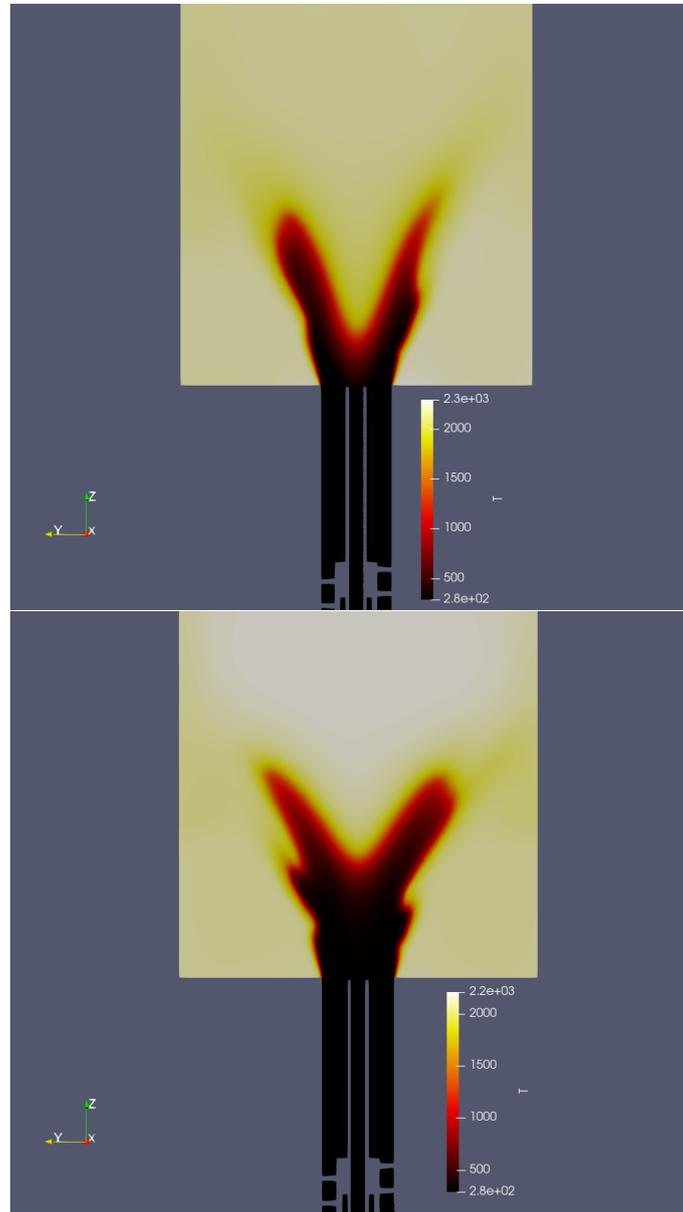


Figura 10: Comparación de la distribución de temperatura: Arriba (a) Esquema de segundo orden con  $\gamma = 0,5$ , Abajo (b) Esquema de primer orden *upwind*.

La figura 10 muestra las distribuciones de temperatura para ambos esquemas numéricos. Se observa como al utilizar esquemas de primer orden, la temperatura máxima se reduce ligeramente y la zona de bajas temperaturas a la salida del quemador se ve ensanchada y alargada.

## Concentración de OH

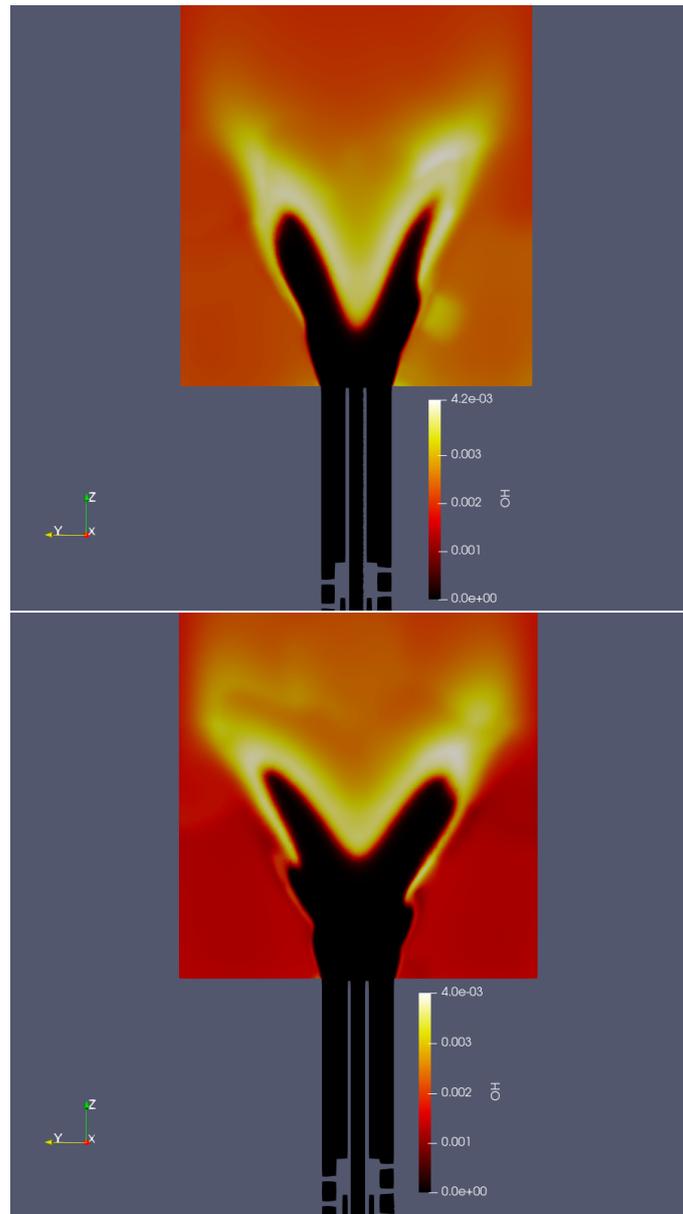


Figura 11: Comparación de la concentración de OH: Arriba (a) Esquema de segundo orden con  $\gamma = 0,5$ , Abajo (b) Esquema de primer orden *upwind*.

La figura 11 muestra las concentraciones de OH para ambos esquemas numéricos. Se observa como al utilizar esquemas de primer orden, los radicales de OH se ven mucho más dispersados por el volumen de control, llegando a producirse en zonas muy por delante del frente de llama.

Valor de  $\dot{Q}$



Figura 12: Comparación del valor de  $\dot{Q}$ : Arriba (a) Esquema de segundo orden con  $\gamma = 0,5$ , Abajo (b) Esquema de primer orden *upwind*.

La figura 12 muestra el valor de  $\dot{Q}$  para ambos esquemas numéricos. El estudio del  $\dot{Q}$  aporta una visualización bastante precisa de toda la zona de reacción y por tanto de la forma que tiene la llama. En este caso, al utilizar esquemas de primer orden, se aprecia como la llama pierde completamente la forma, pese a que se sigue intuyendo como una llama cónica. Aparecen frentes de llama en la altura intermedia de la llama y a su vez se ensancha y se alarga toda la llama.

Estos cambios se deben a que los esquemas de primer orden al no computar tan laboriosamente las variaciones turbulentas, la combustión se ve ligeramente retrasada en todos los puntos de la llama, llevando a esta expansión que se observa.

Por otra parte, los valores integrados de la potencia del quemador en cada caso son los

siguientes:

$\dot{Q}_{\gamma}$ [W]	$\dot{Q}_{upwind}$ [W]
10349.7	10761.3

Tabla 11: Valor de la potencia del quemador en función del esquema utilizado.

En la tabla 11 se observa como al tener una zona de reacción más amplia, el resultado de utilizar esquemas de primer orden provoca una subida en la potencia del quemador, que no se considera real.

### 7.1.3. Conclusión

Una vez que se ha determinado que los esquemas de primer orden no permiten alcanzar un resultado completo y preciso, es necesario investigar esquemas más precisos sin que provoquen que se tenga que asumir un coste computacional mucho mayor, por ello, se opta por utilizar el esquema gamma de tipo TDV, que permite ajustar un balance entre primer y segundo orden, asegurando precisión y bajo coste computacional.

Un gamma de 0.5 es el valor elegido que permite obtener una llama con forma estable, a partir de este valor, las variaciones de la solución son despreciables en comparación con el coste computacional que añaden.

## 7.2. Aspectos Clave de la Simulación CFD del Quemador

En los resultados de la simulación del quemador, es crucial observar y analizar varias variables y fenómenos para entender completamente el comportamiento del sistema. Los aspectos clave incluyen:

- **Distribución de Temperatura:**

La temperatura es una variable fundamental en la simulación de un quemador, ya que afecta directamente la eficiencia de la combustión y la formación de contaminantes. La distribución de temperatura de esta simulación se puede observar en la figura 13.

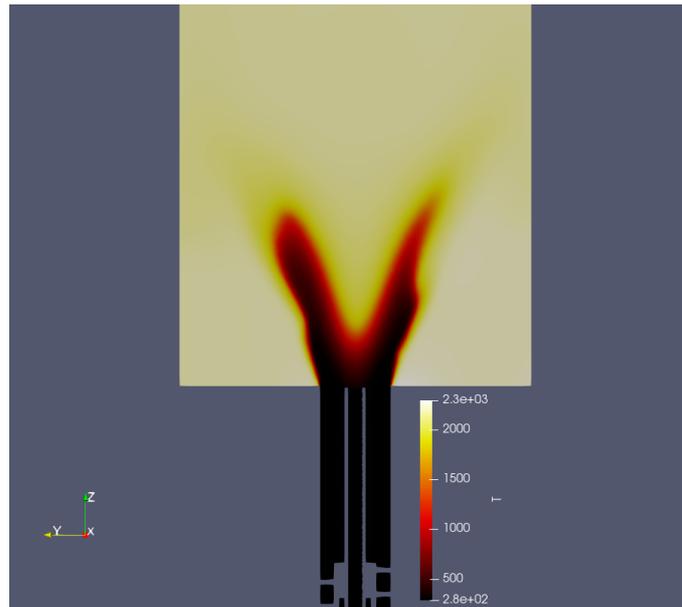


Figura 13: Distribución del campo de temperatura.

Es interesante tomar nota de la temperatura máxima que alcanza el quemador, en este caso 2300 K, ya que está directamente relacionado con la producción de contaminantes. Además es importante observar las zonas donde pudiera haber gradientes de temperatura muy notables que pudieran comprometer la estructura del quemador, en este caso quemando metano en las condiciones establecidas, los gradientes de temperatura no supondrían un problema.

- **Fracciones másicas de Especies Químicas:**

Es importante analizar la distribución de especies químicas como el metano ( $\text{CH}_4$ ), oxígeno ( $\text{O}_2$ ) y monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ). Estas concentraciones proporcionan información sobre la eficiencia de la combustión y la formación de productos de combustión.

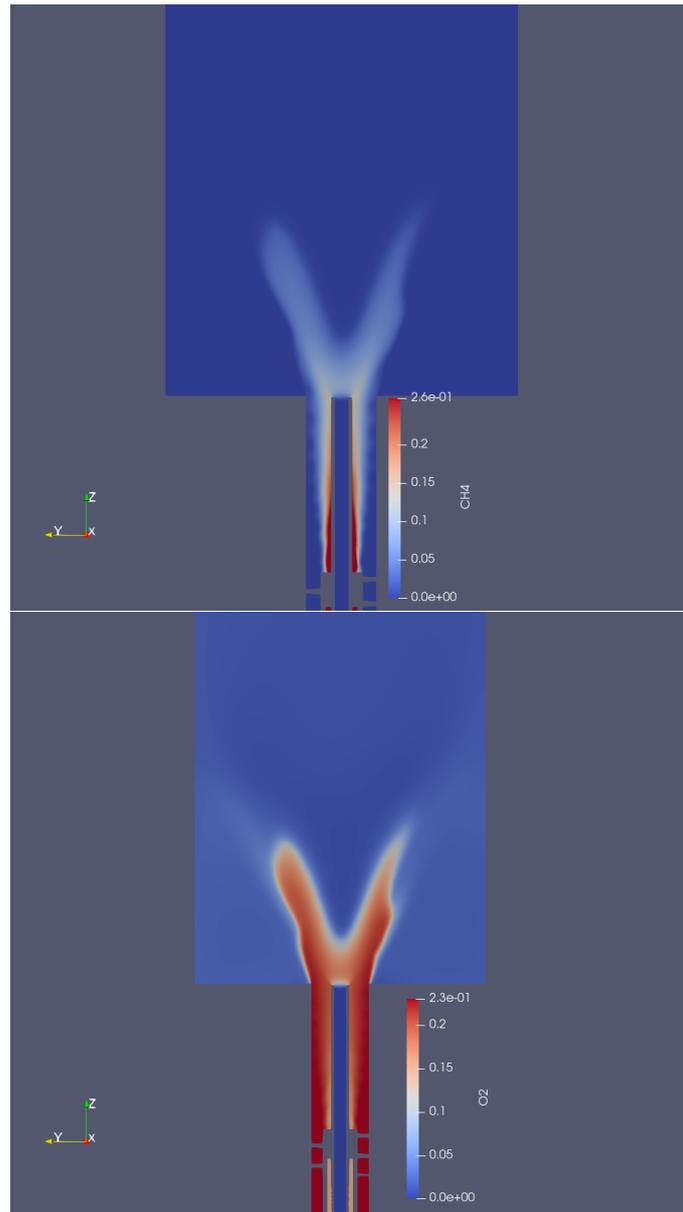


Figura 14: Fracción másica de CH4 y O2.

En la figura 14 (a) se puede observar como todo el metano se consume una vez superado el frente de llama, indicando la eficiencia de la combustión. Por otra parte, si se observa la concentración de O<sub>2</sub> en (b), se aprecia como quedan residuos de oxígeno a lo largo de toda la cámara de combustión.

Este fenómeno es lo que cabría esperar dado el factor de equivalencia  $\phi$  que se ha elegido para la simulación, 0.9, es decir, que hay más proporción de aire respecto al combustible que la relación estequiométrica, generando una mezcla ligeramente pobre que permite quemar con seguridad todo el combustible.

Por otra parte para analizar lo limpia que es la combustión se puede observar la figura 15.

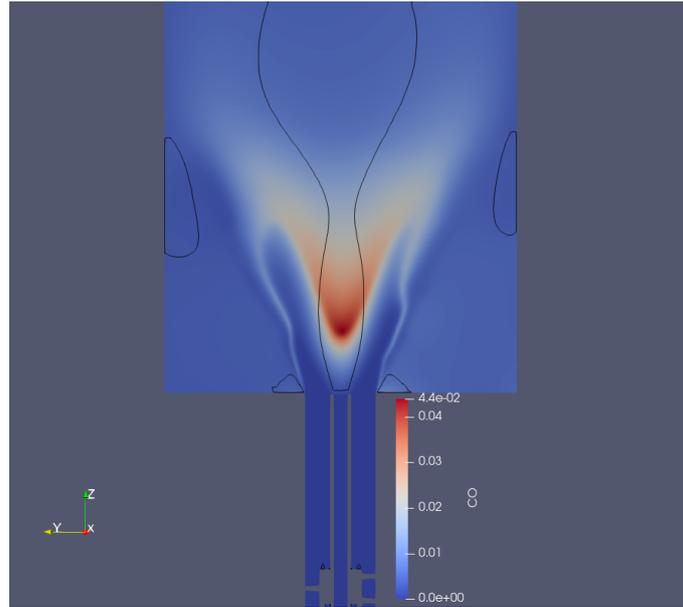


Figura 15: Fracción másica de CO.

En esta figura se observa como prácticamente todo el CO, que se considera producto intermedio de combustión, se va reduciendo casi a 0 desde que se inicia la combustión hasta que se alcanza el final de la cámara de combustión, lo cual denota una combustión completa y limpia.

- **Campos de Velocidad:**

El análisis de los campos de velocidad permite entender la dinámica del flujo dentro del quemador, incluyendo la formación de vórtices, recirculaciones y zonas de estancamiento. Esto es crucial para optimizar la mezcla de aire y combustible y mejorar la eficiencia de la combustión.

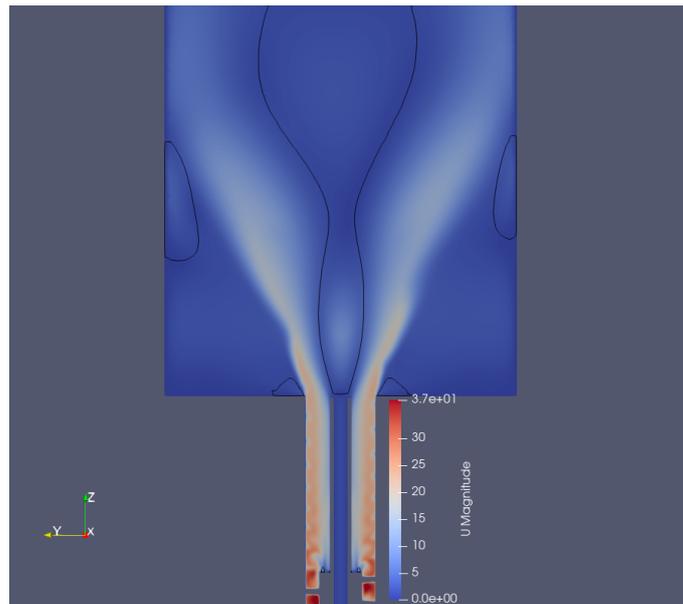


Figura 16: Campo de velocidad.

En la figura 16 se observan varios factores que determinan la precisión de la simulación.

En primer lugar, en la región del swirler, se observa como todo el flujo se ve afectado por el efecto rotatorio, lo que ayuda a la mezcla con el flujo premezclado que viene por el conducto interno.

Por otra parte, el cuerpo vacío del conducto de H<sub>2</sub> actúa como bluff body, añadiendo más turbulencia a la velocidad justo al entrar a la cámara de combustión, lo cual ayuda todavía más a que la mezcla sea más homogénea y la combustión más eficiente.

Por último, el efecto venturi se aprecia en ambos conductos, en el conducto de aire puro, al encontrar un estrechamiento (swirler) se ve aumentada la magnitud de la velocidad, mientras que el conducto de premezcla, al llegar al punto que se abre el conducto y se mezcla con el swirler, se ve ralentizado por el cambio de sección.

#### ■ Tasa de Liberación de Calor ( $\dot{Q}$ ):

La tasa de liberación de calor es una medida directa de la energía liberada durante la combustión o potencia. Es útil para evaluar la eficiencia del quemador y la distribución del calor generado.

Además, si se representa esta variable en paraView, al generarse todo el calor en la zona de reacción, permite observar con precisión la forma de la llama, como se puede observar en la figura 17

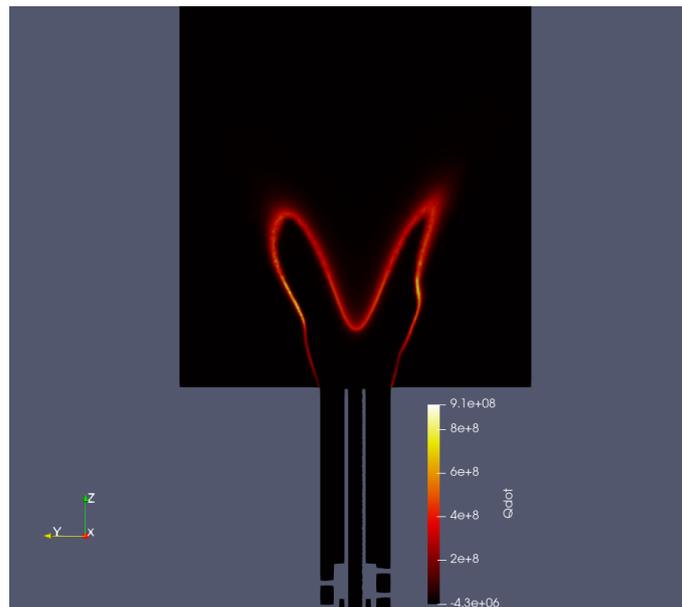


Figura 17: Campo de la tasa de liberación de energía  $\dot{Q}$  [ $W/m^3$ ].

Por otra parte, integrando en todo el dominio gracias a paraView, se puede obtener el valor de potencia del quemador en vatios, como se observa en la tabla 12

$\dot{Q}$ [W]
10349.7

Tabla 12: Valor de la potencia del quemador.

Este valor se puede calcular teóricamente para comprobar si los resultados de la simulación son coherentes con los resultados esperados, para ello, se hace uso de la ecuación 7.2.

$$\dot{Q} = \dot{m}_{fuel} \cdot LHV_{fuel} \quad (7.1)$$

donde:

- $\dot{m}_{fuel}$  es el flujo másico del combustible (en kg/s).
- $LHV_{fuel}$  es el poder calorífico inferior del combustible (en J/kg).

Sustituyendo por los valores del estudio:

$$\dot{Q} = 0,0002167kg/s \cdot 50MJ/kg = 10834,78W \quad (7.2)$$

Un valor de potencia muy similar al obtenido en la simulación, lo cual es un buen indicador de que el proceso seguido es correcto.

## 8. Resultados para cambios en el Reparto de Aire en la Entrada

En esta sección, se presentan los resultados de un estudio comparativo que analiza el efecto de variar la cantidad de aire en el conducto de premezcla de un quemador. En particular, se evalúan dos escenarios distintos:

- **Escenario 1:** Simulación en la condición de operación nominal, con un 15 % del aire total respecto al conducto de aire puro.
- **Escenario 2:** El conducto de premezcla introduce un 15 % del aire total respecto al conducto de aire puro.

Este parámetro se conoce como **Air Ratio** (AR). Manteniendo constante el gasto másico total de aire en ambos casos, se recalculan los flujos másicos tanto de aire como de combustible para asegurar que las condiciones de operación sean comparables entre los dos escenarios. La cantidad de aire en el conducto de premezcla afecta significativamente la calidad de la mezcla aire-combustible, lo cual influye en la eficiencia de la combustión, la distribución de temperatura, la formación de contaminantes y otros aspectos importantes del proceso de combustión.

### 8.1. Objetivo del Estudio

El objetivo principal de este estudio es investigar cómo varía el comportamiento del quemador al modificar el Air Ratio en el conducto de premezcla. Se busca identificar las diferencias en los perfiles de temperatura, las concentraciones de especies químicas (como OH y CH<sub>2</sub>O), la tasa de liberación de calor ( $\dot{Q}$ ), y otros parámetros relevantes.

### 8.2. Metodología

Para llevar a cabo este análisis, se realizan simulaciones del quemador bajo las dos condiciones de AR especificadas. Los resultados de cada simulación se analizan utilizando Paraview. Las variables de interés se comparan para entender las diferencias inducidas por el cambio en el Air Ratio. Las principales etapas del estudio incluyen:

### 8.3. Condiciones Iniciales del caso AR = 15 %

Recalculando los gastos másicos de aire y combustible teniendo en cuenta que el gasto total de aire se mantiene constante, se obtienen los valores presentados en la tabla 13.

$\dot{m}_{\text{aire, premix}}$ [kg/s]	$\dot{m}_{\text{aire, swirler}}$ [kg/s]	$\dot{m}_{\text{aire, swirler}}$ [kg/s]
0.000620833	0.003518056	0.000216696

Tabla 13: Valores de gasto másico de aire para caso AP = 15 %.

Que se introducen en la componente de velocidad para simular el nuevo estado del quemador de gas.

## 8.4. Convergencia

Una vez lanzado el nuevo caso, es necesario realizar nuevamente el análisis de convergencia de la simulación, para ello, se estudiarán nuevamente los valores del gasto másico a la entrada y salida del problema y los residuales de cada variable.

### 8.4.1. Datos de Simulación

Los resultados de los residuales de la simulación son los siguientes para la última iteración calculada:

Variable	Initial Residual	Final Residual	No Iterations
$\rho$	0	0	0
Ux	3.75635e-05	5.43247e-07	1
Uy	3.51464e-05	4.70808e-07	1
Uz	6.11602e-05	8.91176e-08	1
H2	3.98576e-05	1.08395e-07	1
H	6.18293e-05	1.60402e-07	1
O	6.51762e-05	1.1187e-07	1
O2	6.64777e-06	1.97467e-07	1
OH	2.91356e-05	8.79442e-07	1
H2O	6.56706e-06	1.97257e-07	1
HO2	0.000343846	1.1201e-07	2
CH2	0.000559988	2.96281e-07	2
CH2(S)	0.00055754	2.66736e-07	2
CH3	0.000303574	5.79089e-07	1
CH4	5.00719e-06	1.43119e-07	1
CO	4.28626e-05	9.9532e-08	1
CO2	6.16561e-06	1.85393e-07	1
HCO	0.000538164	1.24065e-07	2
CH2O	0.000178717	5.08163e-07	1
CH3O	0.000506364	1.32693e-07	2
C2H4	0.000177563	4.53061e-07	1
C2H5	0.000405603	7.7919e-07	1
C2H6	0.000160044	4.56695e-07	1
h	6.29641e-06	1.87054e-07	1
p	0.00129977	1.29402e-05	62
p	0.000268828	2.46039e-06	67
p	9.85311e-05	9.8748e-07	21
$\rho$	0	0	0
time step continuity errors:	sum local = 1.49989e-08	global = -5.15429e-09	
p	9.16984e-05	9.79532e-07	

Tabla 14: Tabla de Residuales y Número de Iteraciones para Diferentes Variables

Los gastos másicos en la entrada y salida son:

- Gasto másico a la entrada: 0,004355585 kg/s

- Gasto másico a la salida: 0,004257893 kg/s

#### 8.4.2. Análisis de Convergencia

- **Residuos de las Variables Primarias:** Los residuos de las variables primarias (velocidades  $U_x$ ,  $U_y$ ,  $U_z$ , y las especies químicas) muestran una disminución significativa en sus valores iniciales y finales. La mayoría de las variables han alcanzado residuos finales en el orden de  $10^{-7}$  o menores, lo cual indica una convergencia adecuada. Esto es crucial ya que asegura que las soluciones numéricas son estables y fiables.
- **Residuos de Presión y Continuidad:** Los residuos de la ecuación de presión y continuidad también muestran una convergencia adecuada, con residuos finales disminuyendo a valores tan bajos como  $10^{-6}$  y  $10^{-7}$  respectivamente. Esto indica que las soluciones de la presión están bien resueltas y que la masa está bien conservada en el sistema.
- **Errores de Continuidad del Paso de Tiempo:** Los errores de continuidad del paso de tiempo son muy bajos (del orden de  $10^{-8}$ ), lo cual refuerza que la simulación mantiene un balance de masa consistente a través de los pasos de tiempo.
- **Diferencia en Gasto Másico:** La diferencia entre los gastos másicos de entrada y salida es  $0,004355585 - 4,25789300 \times 10^{-3} = 9,75582 \times 10^{-5}$  kg/s. Esta diferencia es pequeña, del 2.18 %, situándose por debajo del 5 %, lo que sugiere que la simulación ha alcanzado un estado casi estacionario en términos de conservación de masa.

#### 8.4.3. Conclusión

La simulación CFD para el quemador con un Air Ratio de 15 % muestra una buena convergencia. Los residuos de las variables principales y la ecuación de presión han disminuido a niveles muy bajos, los errores de continuidad son mínimos y la discrepancia en el gasto másico es insignificante. Estos factores en conjunto indican que la simulación ha alcanzado un estado estable y que los resultados obtenidos son fiables para su análisis posterior.

### 8.5. Estudio Comparativo entre AR 10 % y AR 15 %

Una vez convergidos ambos casos, se va a realizar un estudio comparativo de las distribuciones de especies y los campos más importantes para observar las diferencias. Todas las imágenes han sido obtenidas mediante el software de ParaView tras realizar un análisis de resultados.

#### 8.5.1. Distribución de Temperatura

Las distribuciones de temperatura se pueden observar en la figura 18

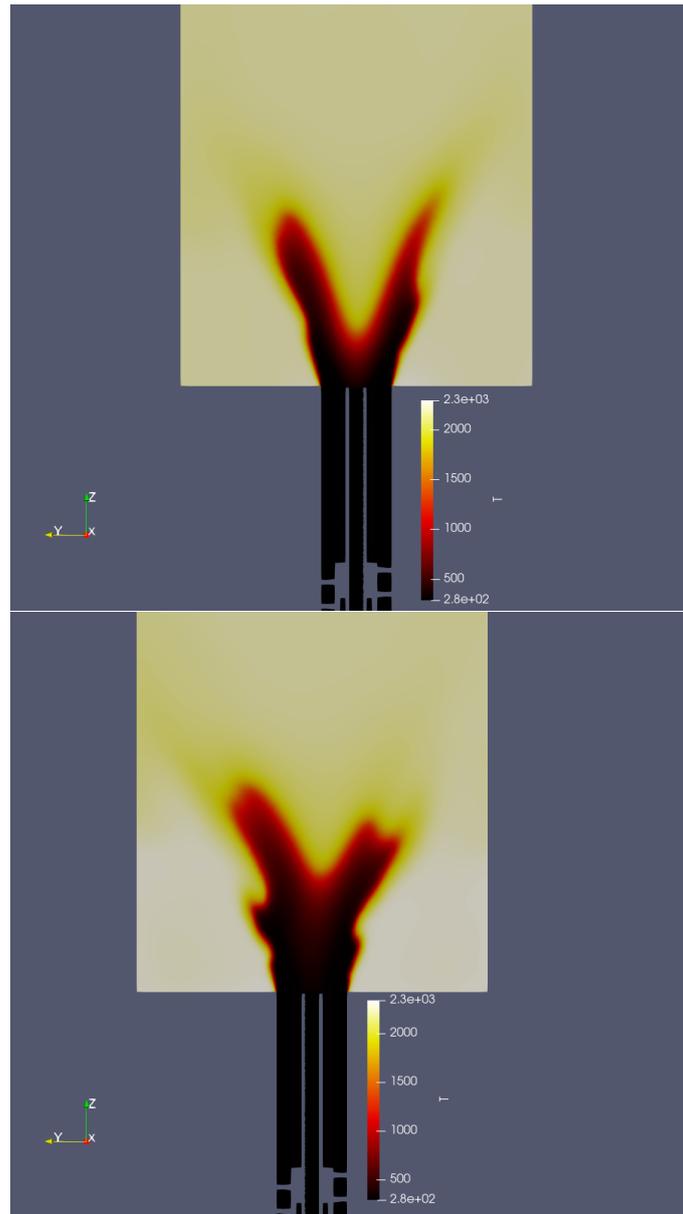


Figura 18: Campo de temperatura de la solución con  $AR = 10\%$  (a) y  $AR = 15\%$  (b) [K].

En los campos de temperatura se puede observar como ambas distribuciones son muy similares, lo cual indica que nos encontramos en estados de combustión muy parecidos, esto concuerda con la información presentada en el documento (20) al respecto de los casos de  $AR = 10\%$  y  $AR = 15\%$  con un caudal de  $14.9 \text{ kg/h}$ , donde se observa visualmente que el caso  $AR = 15\%$  tiene un cono muy similar pero ligeramente más ancho y corto, lo cual concuerda con la distribución de temperaturas que se está observando.

### 8.5.2. Fracciones Másicas de Especies

Las fracciones másicas de  $\text{CH}_4$  se pueden observar en la figura 19

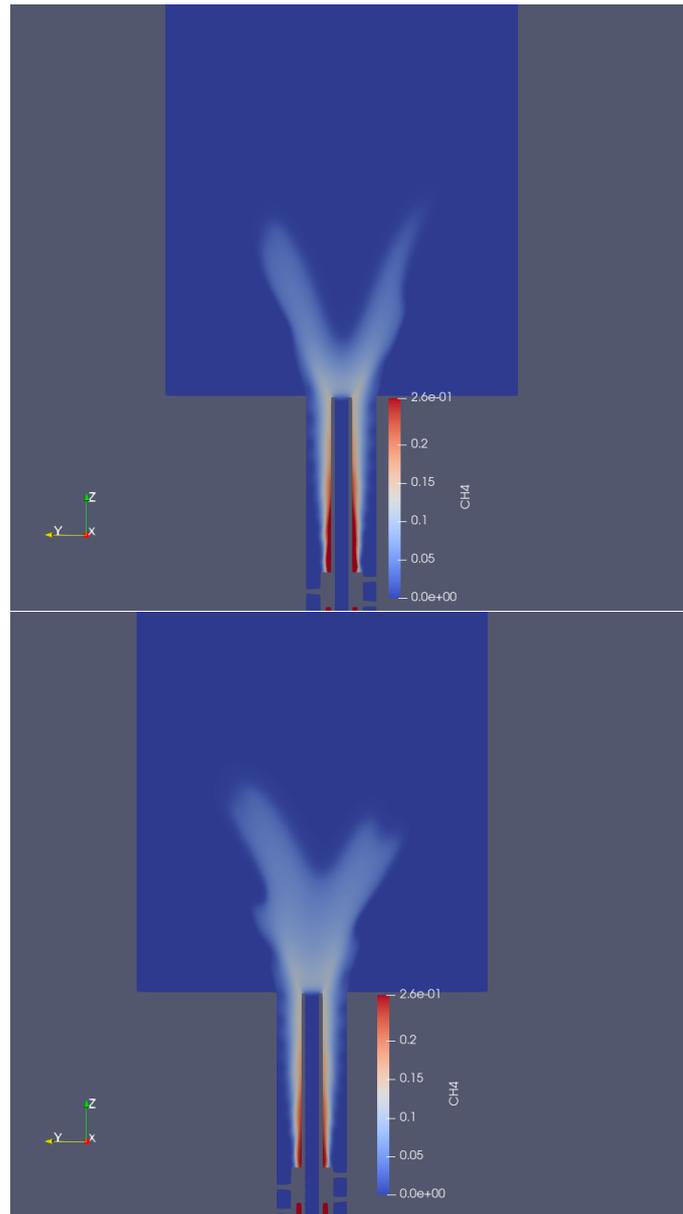


Figura 19: Fracciones másicas de CH<sub>4</sub> de la solución con AR = 10% Arriba (a) y AR = 15% Abajo (b) [-].

En ambas simulaciones, todo el CH<sub>4</sub> se consume completamente, ya que en ambas se utiliza un dosado ligeramente pobre. Además, se puede observar en la intensidad de colores como las fracciones másicas de metano son menores en el caso (b), esto debido a que al haber más aire en la premezcla, el metano se ve más diluido.

Por otra parte, las fracciones de O<sub>2</sub> se pueden observar en la figura 20

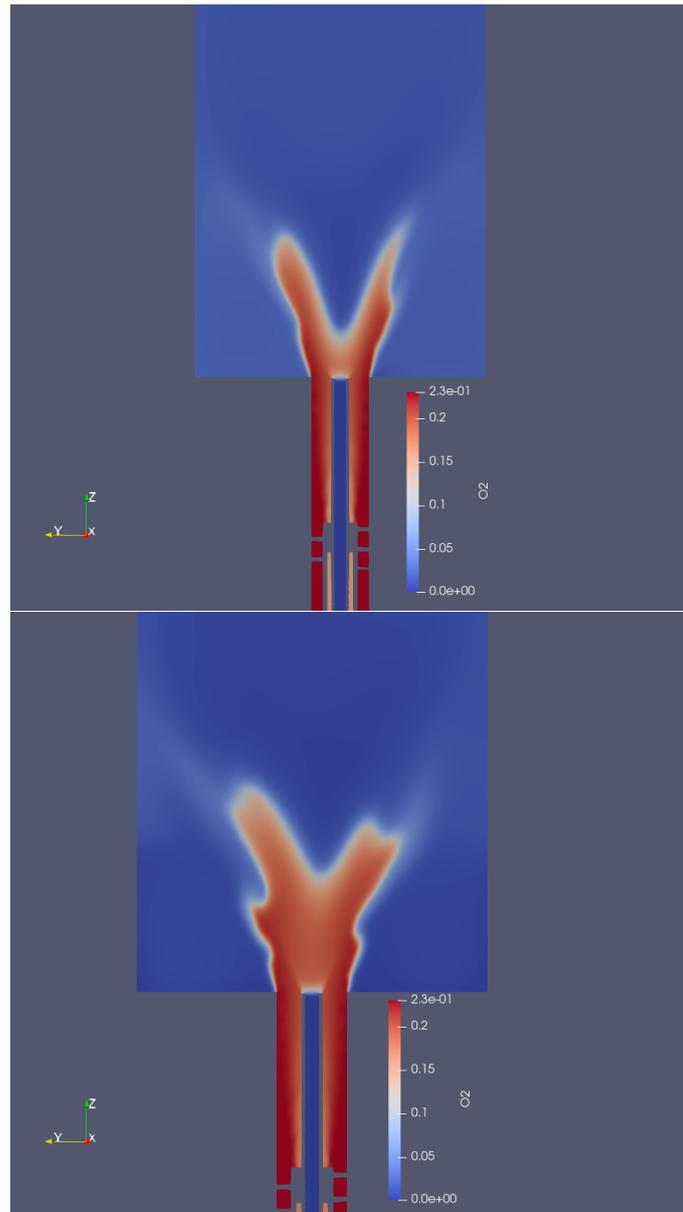


Figura 20: Fracciones másicas de O<sub>2</sub> de la solución con AR = 10% Arriba (a) y AR = 15% Abajo (b) [-].

En el caso del oxígeno el análisis es muy parecido, al tener un dosado relativo de 0.9%, queda oxígeno tras la combustión, que en cada caso se distribuye a lo largo de la cámara de combustión guiado por las velocidades del fluido.

Por otra parte, las fracciones de CO se pueden observar en la figura 21

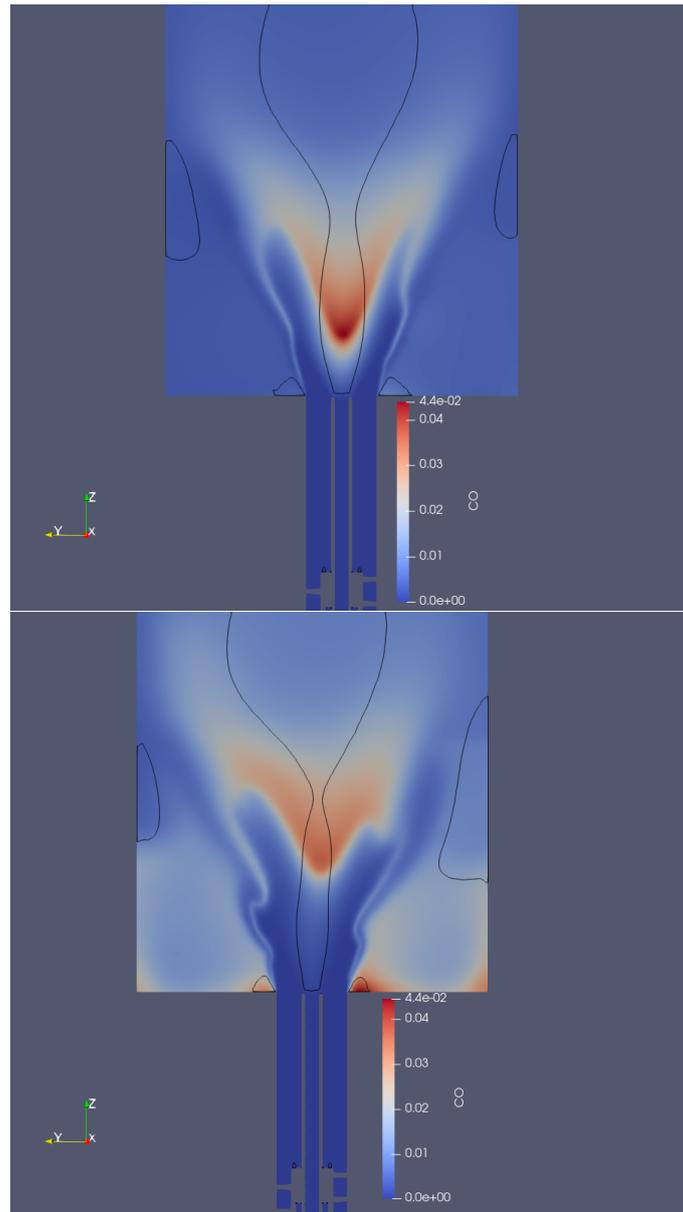


Figura 21: Fracciones másicas de CO de la solución con AR = 10% Arriba (a) y AR = 15% Abajo (b) [-].

El caso de la fracción másica de CO si que presenta diferencias en cuanto a su distribución entre simulaciones, en el caso (b) se ha representado la isolinea de velocidad 0 para comprobar que la región donde queda atrapado el CO a la salida del conducto de entrada es en efecto una zona de recirculación.

Esta zona se aprecia también en la figura (a) pero con mucha menor cantidad de CO, este indicador da a entender que el proceso de quemado con el AR = 15% es más lento que el de AR = 10%, lo que provoca que el CO permanezca durante más tiempo en los alrededores de la llama.

### 8.5.3. Campo de Velocidad

El campo de velocidades se puede observar en la figura 22

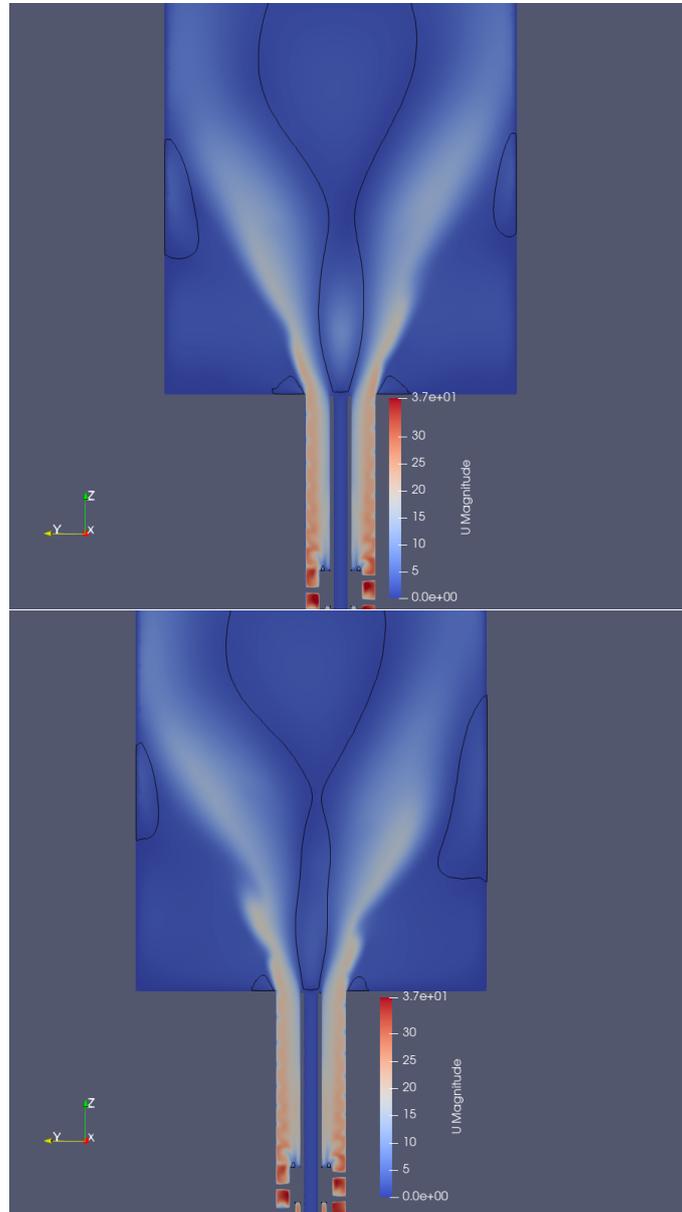


Figura 22: Campo de velocidades de la solución con  $AR = 10\%$  Arriba (a) y  $AR = 15\%$  Abajo (b) [m/s].

Observando el campo de velocidades de cada caso, se puede apreciar como en el caso (b), al subir del 10 al 15%, se reduce el flujo en el *swirler*, esto es, a la salida del orificio el flujo sale con un poco menos de rotación, y por tanto se abrirá menos al entrar en la cámara. La zona de recirculación es más estrecha y alargada. Eso hace que la zona de reacción se concentre más cerca del eje central de la cámara de combustión y se extienda más en la dirección axial.

#### 8.5.4. Potencia del Quemador y Forma de la Llama

Para observar la forma del frente de llama se configura en ParaView la visualización del calor liberado  $\dot{Q}$ , en la figura 23.



Figura 23: Calor liberado en la solución con  $AR = 10\%$  Arriba (a) y  $AR = 15\%$  Abajo (b) [ $W/m^3$ ].

En primer lugar es importante resaltar lo que ya se ha determinado en los otros análisis, la forma de la llama de la figura (a) es ligeramente más alargada y estrecha que la llama de la figura (b), ambas con forma de cono.

En el caso (b), la parte central del cono se enciende más adelante en el eje central que el caso (a), esto debido nuevamente al efecto reducido del swirler en este caso, que provoca que una recirculación más estrecha en el eje retrase la mezcla y por lo tanto la combustión

en el mismo eje.

Por otra parte, se comparan las potencias de ambos quemadores en la tabla 15.

$\dot{Q}$ [W]
10349.7
10362.8

Tabla 15: Valor de la potencia de quemador de la solución con AR = 10% Arriba (a) y AR = 15% Abajo (b) [W].

En este caso se observa como ambas soluciones se encuentran en un punto bastante estable en cuanto a la combustión de esta proporción de metano y aire, dando lugar a potencias muy similares. Se debe tener en cuenta que dado que la cantidad de combustible es la misma, la potencia debería ser la misma si se consume todo el combustible.

## 9. Verificación de la Simulación

La validación de simulaciones CFD mediante datos experimentales es esencial para asegurar la precisión de los modelos numéricos empleados. En este caso, se compararán los resultados de la quimioluminiscencia de  $\text{OH}^*$  obtenidos del quemador experimental ubicado en el CMT con las concentraciones de  $\text{OH}^*$  simuladas numéricamente. Es importante destacar que las imágenes del quemador real son en 2D y recogen la concentración de  $\text{OH}^*$  a lo largo de toda la línea de visión, mientras que en ParaView si se observa la fracción de OH, esta corresponde a un compuesto que tiene una mayor vida en la cámara de combustión.

Por este último motivo, la comparación visual para verificar los datos no se hace contra la fracción de OH obtenida por ParaView, sino contra el calor liberado  $\dot{Q}$  promediado a lo largo de todos los planos de la simulación del caso nominal estudiado, es decir, con  $\text{AR} = 10\%$ . Este contorno al igual que la quimioluminiscencia del  $\text{OH}^*$  en el quemador experimental, nos permite observar la forma del frente de llama y compararla en ambos casos para realizar la verificación.

### 9.1. Metodología

Las imágenes experimentales 24 de quimioluminiscencia de OH fueron obtenidas del quemador experimental. Estas imágenes muestran la emisión de OH a lo largo de la línea de visión de la cámara, proporcionando una representación en 2D de la distribución espacial de  $\text{OH}^*$  en la llama.

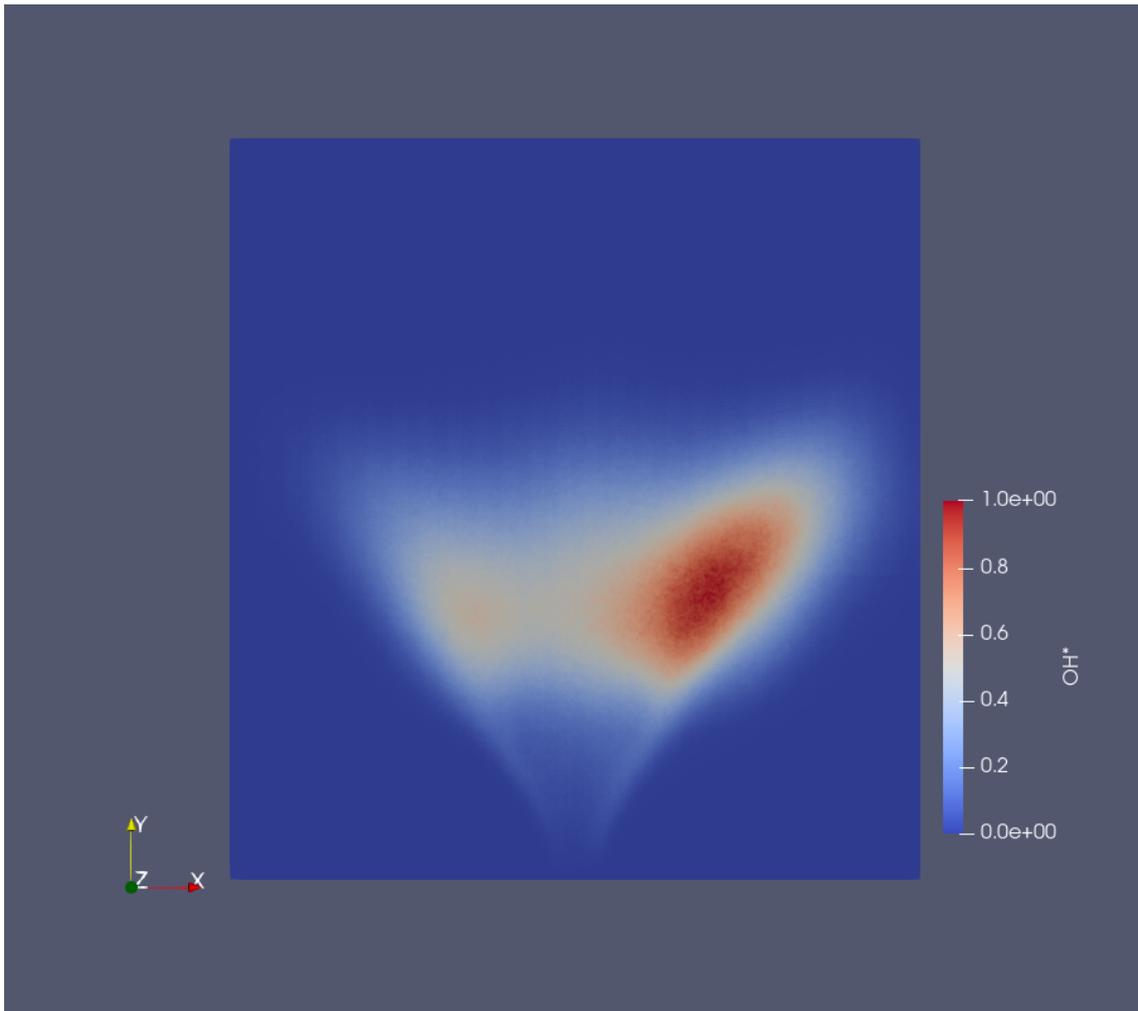


Figura 24: Visualización de quimioluminiscencia del OH\* del quemador experimental.

Las simulaciones CFD del quemador fueron realizadas utilizando un modelo adecuado para capturar la dinámica de las llamas y las reacciones químicas presentes. El calor liberado  $\dot{Q}$  se ha promediado mediante un script de python a lo largo de toda la profundidad de la solución, generando una imagen del frente de llama como se puede observar en la figura 25.

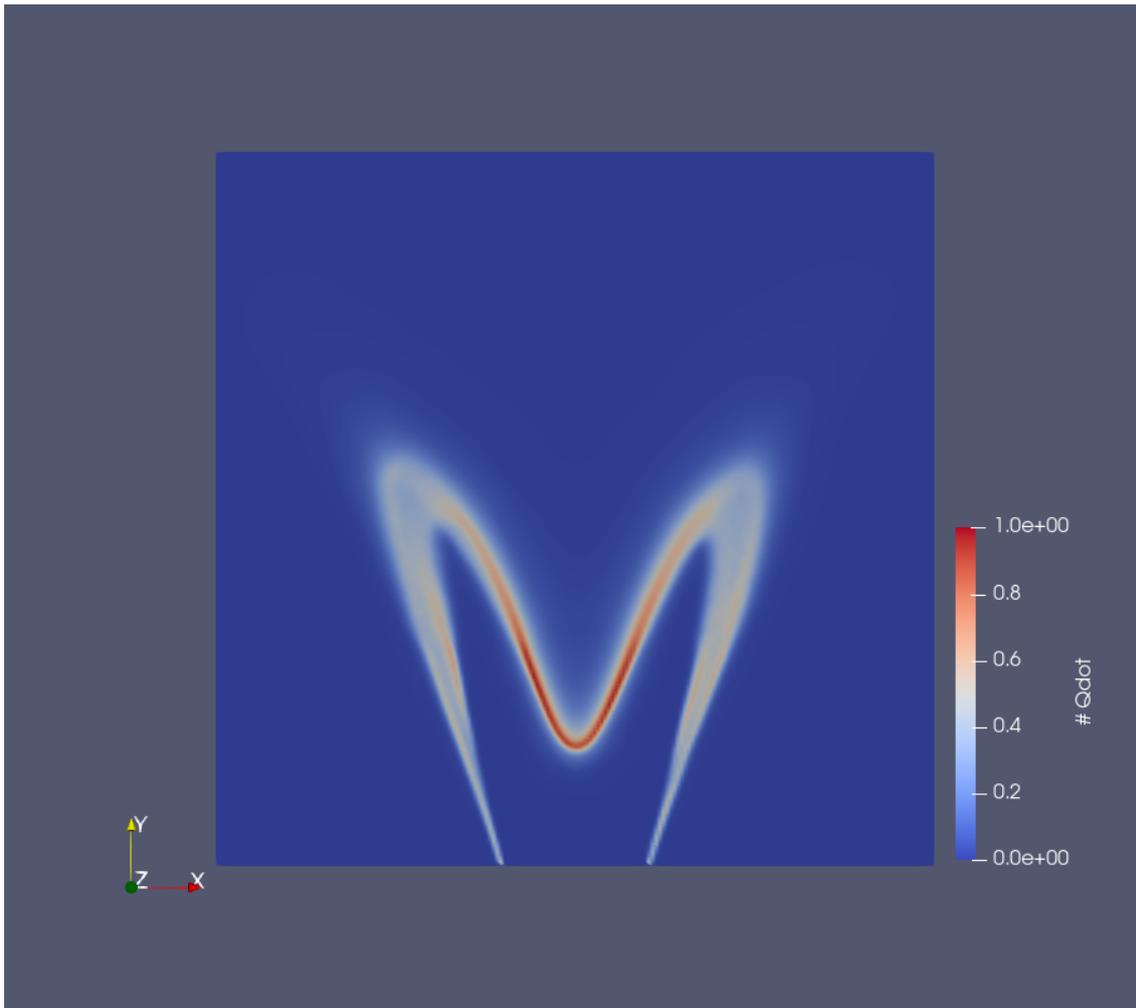


Figura 25: Promedio del  $\dot{Q}$  en toda la profundidad de la simulación.

Al comparar los resultados experimentales y simulados, se debe considerar que la imagen presentada en la figura 25 representa el calor liberado en el dominio, normalizado para poder hacer una comparación directa con la imagen obtenida del quemador experimental. A su vez, cabe destacar que lo que se compara es la forma de la llama, ya que tanto el  $\dot{Q}$  como el  $\text{OH}^*$  son indicadores que ayudan a localizar el frente de la llama, pero la distribución de estos es claramente distinta.

Observando ambas imágenes lo primero que cabe destacar es la forma de la llama, generada en ambos casos como un cono que emana de la salida del conducto de entrada con la anchura del mismo, y se va ensanchando hasta que toda la mezcla termina de combustionar en el punto más lejano de la cámara de combustión.

La longitud de ambas llamas es muy similar, lo cual puede sugerir que la mezcla de especies gracias a la turbulencia ha sido simulada correctamente, de forma que el punto en el cual cada parte de la llama alcanza las condiciones de combustión son momentos temporales muy similares. Esto puede ser debido a que el modelo de combustión EDC (Eddy Dissipation) simula correctamente la llama introducida y la parte de combustión está correctamente convergida.

Por otra parte, si se analiza la amplitud horizontal de la llama, son similares pero la llama del quemador experimental a primera vista parece generar un cono ligeramente más ancho que el cono de simulación. Esto puede deberse a que el efecto del swirler en la velocidad esté siendo subestimado por los esquemas utilizados para el cálculo de velocidad. Sin embargo, esto también puede tener como causa que las pérdidas de velocidad del fluido en el quemador experimental sean superiores a las que están siendo simuladas, de forma que al contener más velocidad a la salida del conducto, el cono simulado aparenta ser más cerrado que el cono real.

Por último, cabe destacar que los experimentos muestran llamas despegadas, pero las simulaciones no. Hay que tener en cuenta que el modelo tiene limitaciones en turbulencia (RANS) y en reacción química, el problema real es más complejo de modelar de lo que se puede hacer en esta primera iteración.

## 10. Conclusión

El objetivo del trabajo presente era el modelado de un quemador experimental de metano ( $\text{CH}_4$ ) ubicado en el CMT, para permitir la realización de análisis muy económicos mediante el uso de CFD. Por otra parte se pretendía que este modelo permitiera hacer correctamente el cambio de condiciones iniciales, concretamente de gastos másicos de cada componente a la entrada del quemador y conseguir que la simulación se mantenga correcta tras la convergencia. Una vez definidos estos objetivos, se puede determinar que han sido alcanzados con éxito a la fecha de finalización de este documento, constituyendo una herramienta útil en futuros cálculos para el departamento.

Este estudio ha determinado a su vez las siguientes conclusiones más específicas:

- Se ha obtenido una configuración de solvers y esquemas numéricos que se aproxima a optimizar la relación entre coste computacional y precisión de los resultados.
- El estudio de los cambios al modificar el AR de 10 % a 15 % no presenta cambios significativos ya que de acuerdo al documento (20) del quemador, estos casos se encuentran cerca del punto óptimo, si se realizan simulaciones más lejanas de este punto, puede producirse el apagado o despegado de la llama. Además se ha cumplido el objetivo de poder realizar el cambio de condiciones iniciales de forma estable, pudiendo comparar los resultados de ambas.
- La validación experimental pese a ser exclusivamente visual, aporta conclusiones relativamente satisfactorias para la definición del modelo como preciso.
- El caso base de partida con independencia de malla para el quemador en cuestión tiene un número de celdas muy elevado, lo que conlleva simulaciones muy costosas computacionalmente que obligan a buscar soluciones del mínimo orden de complejidad posible para hacer factible el uso del modelo.
- El análisis de convergencia de residuales y gasto másico se debe realizar con cada mínimo cambio de las condiciones iniciales, sin embargo, si se parte del caso con AR de 10 % ya convergido, la nueva convergencia es mucho más rápida.
- El parámetro que más afecta a la convergencia resulta ser la presión, con lo cual es el que más atención requiere y al que más soluciones por iteración hay que someter.
- El uso de OpenFOAM y ParaView pese a requerir mucho más trabajo para configuración y definición del caso, una vez determinado el modelo, proporcionan una solución de coste cero para la simulación CFD.
- Para encender una llama en una simulación de tal cantidad de celdas, es conveniente comenzar con modelos de combustión simplificados ya que el esquema temporal debe ser euler, y una vez desarrollada, pasar a modelos de combustión más complejos y esquemas temporales localEuler.

## Anexo I: Obtención de la Masa de Combustible en una Cámara de Combustión

En este anexo, se explica el proceso para derivar la masa de combustible en una mezcla premix en una cámara de combustión, considerando que el aire entra a través de dos conductos: uno con aire puro y otro con una premezcla de aire y CH<sub>4</sub>. La fórmula que se desea obtener es:

$$\dot{m}_{\text{fuel, premix}} = \frac{\dot{m}_{\text{aire, total}}}{A_{\text{fst}}} \cdot \phi$$

donde:

- $\dot{m}_{\text{fuel, premix}}$  es la tasa de flujo másico de combustible en la mezcla premix.
- $\dot{m}_{\text{aire, total}}$  es la tasa de flujo másico total de aire que entra en la cámara de combustión.
- $A_{\text{fst}}$  es la relación aire-combustible estequiométrica.
- $\phi$  es el factor de equivalencia o dosado relativo.

### 1. Flujo de Aire y Combustible en la Cámara

Para una cámara de combustión con dos fuentes de aire, la tasa de flujo másico total de aire ( $\dot{m}_{\text{aire, total}}$ ) es la suma del flujo de aire puro y el flujo de la premezcla de aire y CH<sub>4</sub>. Si consideramos las contribuciones de ambas fuentes, la tasa total de aire puede expresarse como:

$$\dot{m}_{\text{aire, total}} = \dot{m}_{\text{aire, swirler}} + \dot{m}_{\text{aire, premix}}$$

Donde:

- $\dot{m}_{\text{aire, swirler}}$  es la tasa de flujo másico de aire puro.
- $\dot{m}_{\text{aire, premix}}$  es la tasa de flujo másico de la premezcla de aire y CH<sub>4</sub>.

Para obtener el flujo másico de combustible en la mezcla premix, debemos considerar la relación entre el flujo másico de aire y el flujo másico de combustible. En una mezcla premix, la tasa de flujo másico de combustible es ajustada por el factor de equivalencia:

$$\dot{m}_{\text{fuel, premix}} = \phi \cdot \dot{m}_{\text{fuel, estequiométrico}}$$

Donde  $\dot{m}_{\text{fuel, estequiométrico}}$  es la tasa de flujo másico de combustible necesario para una mezcla estequiométrica ideal.

## 2. Relación Aire-Combustible Estequiométrica

La relación aire-combustible estequiométrica ( $A_{fst}$ ) se define como la relación entre el flujo másico de aire y el flujo másico de combustible para una combustión completa. Si se conoce esta relación, podemos expresar la tasa de flujo másico de combustible en términos de la tasa de flujo másico de aire total:

$$\dot{m}_{\text{fuel, estequiométrico}} = \frac{\dot{m}_{\text{aire, total}}}{A_{fst}}$$

## 3. Obtención de la Masa de Combustible Final

Combinando las ecuaciones anteriores y utilizando el factor de equivalencia, obtenemos:

$$\dot{m}_{\text{fuel, premix}} = \phi \cdot \frac{\dot{m}_{\text{aire, total}}}{A_{fst}}$$

Donde:

- $\frac{\dot{m}_{\text{aire, total}}}{A_{fst}}$  representa la tasa de flujo másico de combustible necesario para una mezcla estequiométrica con la cantidad total de aire.
- $\phi$  ajusta esta tasa para obtener la cantidad real de combustible en la mezcla premix según la relación de dosado relativo.

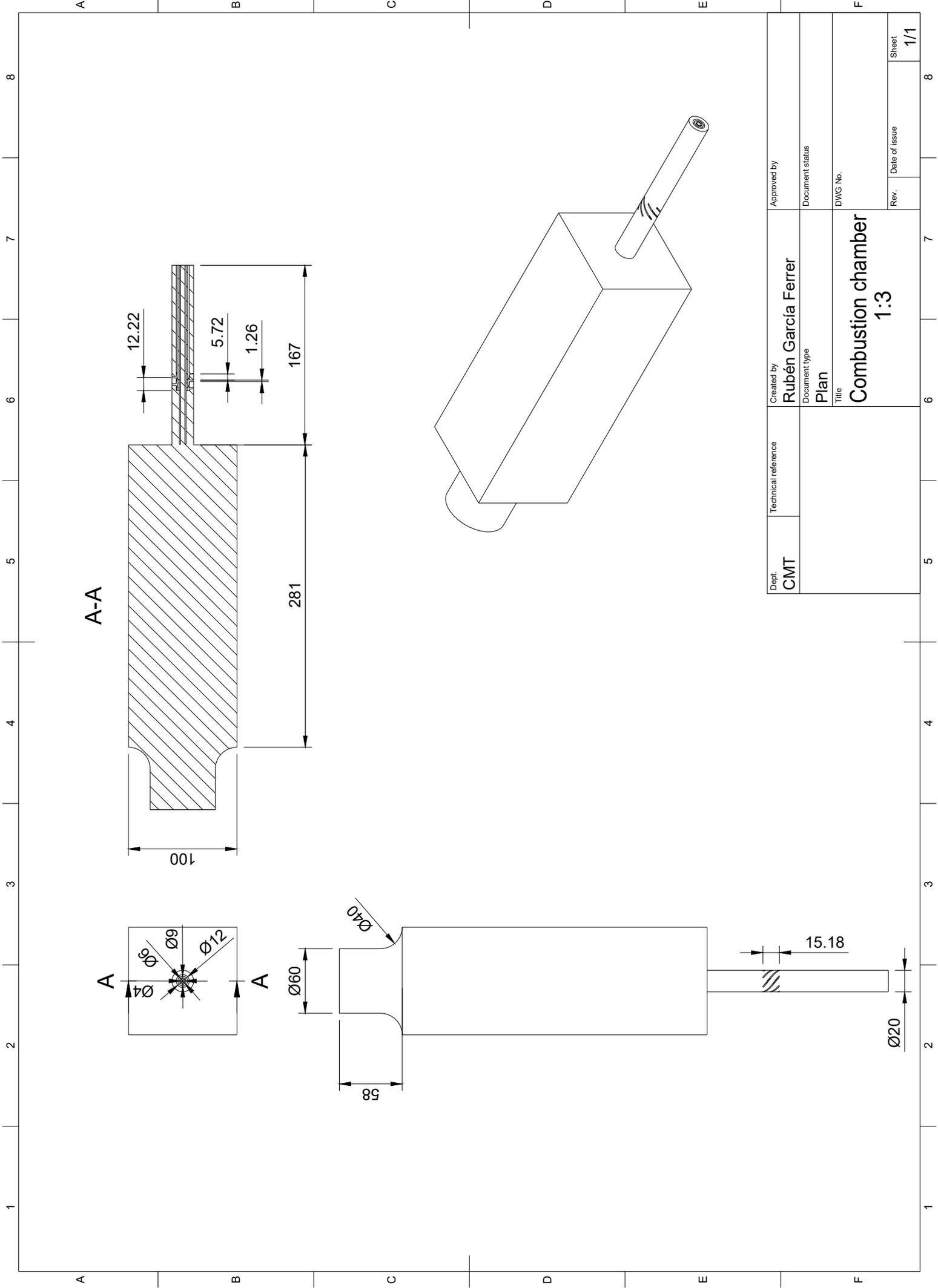
# PLANOS

## 11. Plano

En el diseño y desarrollo de un modelo para simular un quemador de gas, es esencial disponer de un conjunto detallado de planos y medidas precisas. Estos planos proporcionan información crucial sobre las dimensiones, características y especificaciones del quemador, permitiendo una fabricación y ensamblaje correctos del quemador real e información crucial para el desarrollo del modelo 3D.

Para realizar este proceso de diseño y elaboración de planos, se emplea una herramienta de modelado 3D denominada Fusion 360. Fusion 360 es un software de diseño asistido por ordenador (CAD) que ofrece una amplia gama de herramientas y funcionalidades para crear y visualizar objetos en tres dimensiones. A partir de la geometría suministrada por el departamento CMT-Clean Mobility & Thermofluids, es sencillo extraer las tres vistas acotadas del quemador.

Estos planos técnicos incluyen vistas ortogonales, cortes necesarios y anotaciones dimensionales. Además, Fusion 360 permite generar representaciones realistas en 3D, lo que facilita la visualización del quemador de gas en forma de croquis junto al desarrollo de las tres vistas. Las medidas de los planos están en escala 1:3 para un tamaño A4, cumpliendo con las normas ISO.



A-A

A

A

Dept. CMT	Technical reference	Created by Rubén García Ferrer	Approved by
		Document type Plan	Document status
		Title Combustion chamber 1:3	DWG No.
		Rev.	Date of issue
			Sheet 1/1

# Pliego de Condiciones

## **12. Pliego de Condiciones**

En el marco de un Trabajo Fin de Grado, este capítulo juega un rol crucial al establecer las directrices y requisitos que deben seguirse durante la ejecución del proyecto. Su propósito principal es ofrecer una guía clara y detallada sobre los criterios y condiciones que deben considerarse y respetarse durante el desarrollo de la investigación. Además, se explica el cumplimiento de estos criterios y se justifica cualquier situación particular que sea necesaria.

El Pliego de Condiciones generalmente incluye una sección específica que aborda la normativa y otra que trata los decretos relevantes para el tema de investigación. Esto implica identificar y analizar las regulaciones, normas y leyes vigentes que están relacionadas, de manera directa o indirecta, con el Trabajo Fin de Grado.

Este apartado del Pliego de Condiciones tiene como objetivo principal garantizar que el Trabajo Fin de Grado se desarrolle dentro de los límites legales y éticos establecidos. Además, el cumplimiento de la normativa y los decretos relevantes también contribuye a la validez y fiabilidad de los resultados obtenidos en el estudio.

### **12.1. Normativa UPV**

La normativa vigente (9) rige las condiciones para la realización de los Trabajos Fin de Grado en la Universitat Politècnica de València, regulado por la Normativa Marco TFG y TFM (BOUPV 29-03-2018) y su modificación aprobada por el Consejo de Gobierno el 23-12-2021. Los artículos presentados aquí son aquellos que tienen relación directa con el desarrollo del trabajo, omitiendo los que establecen las bases de los tribunales de calificación, estancias en movilidad, asignación y matriculación, ya que no son pertinentes para este análisis.

#### **12.1.1. Capítulo I. Disposiciones Generales**

El Artículo 1 define el ámbito de aplicación de la normativa y su validez para los títulos oficiales en todo el territorio nacional. El Artículo 2 establece las pautas necesarias para realizar un TFG adaptado, abordando la orientación y aplicación del proyecto a las competencias asociadas al título. También se detalla la necesidad de presentar una orientación profesional o investigadora para aquellos títulos que habiliten el ejercicio de profesiones reguladas. Se especifican los conocimientos, habilidades y competencias que el estudiante debe haber adquirido durante sus estudios y se subraya el carácter individual del trabajo. Cada uno de estos apartados ha sido exitosamente alcanzado en el desarrollo del trabajo.

#### **12.1.2. Capítulo II. Tutores y tribunales de calificación**

Los Artículos 3 y 4 establecen los requisitos y deberes de los tutores y cotutores durante la realización del trabajo académico. Estos incluyen la realización de un seguimiento periódico, la orientación adecuada, la vigilancia de la originalidad y calidad del proyecto, y la adecuación de la duración y extensión al número de ECTS correspondiente. En el caso

del presente TFG, tanto el tutor (José María García Oliver) como el cotutor (José Manuel Pastor Enguñados) han cumplido con estas obligaciones. El Artículo 5 define los derechos de los tutores y cotutores, indicando que deben recibir información completa y puntual del progreso y resultados del estudiante, lo cual se ha cumplido satisfactoriamente.

## **12.2. Reales decretos**

Los Reales Decretos también establecen ciertas condiciones aplicables al desarrollo del proyecto. En primer lugar, se destaca que el trabajo se ha realizado en modalidad semipresencial, por lo que deben tenerse en cuenta tanto las normas de las estaciones de trabajo presenciales como las que rigen el teletrabajo. A continuación se detallan los decretos más relevantes y su cumplimiento.

### **12.2.1. RD 822/2021**

El Real Decreto 822/2021 (13) establece las bases y la organización de la enseñanza universitaria. Las partes más relevantes para este TFG están regidas por el Artículo 4.2, que establece la obligatoriedad de inculcar los valores democráticos y los Objetivos de Desarrollo Sostenible, con un enfoque en la sostenibilidad y el cambio climático, conforme al Artículo 35.2 de la Ley 7/2021 de Cambio Climático y Transición Energética. Estos objetivos han sido integrados a lo largo del desarrollo del trabajo. Además, el Artículo 14.6 estipula que el TFG, de carácter obligatorio, tiene como objetivo esencial demostrar el dominio y aplicación de los conocimientos, competencias y habilidades del título universitario, lo cual se ha cumplido.

### **12.2.2. RD 488/1997**

El Real Decreto 488/1997 (12) establece las disposiciones mínimas de seguridad y salud para la utilización de equipos con pantallas de visualización. Dado que este trabajo se ha basado en simulaciones computacionales, se ha verificado el cumplimiento de estas normas. El Artículo 3.1 destaca que el empleador debe adoptar medidas para minimizar los riesgos asociados al uso de pantallas. Durante el desarrollo del TFG, se han utilizado pantallas del departamento y se han tomado los descansos necesarios para preservar la salud, cumpliendo así con la legislación pertinente.

### **12.2.3. RD-ley 10/2021**

Debido a la modalidad semipresencial del trabajo, se ha recurrido al Real Decreto-Ley 10/2021 (14), que regula el trabajo a distancia. El Artículo 5 subraya que el trabajo a distancia es voluntario tanto para el trabajador como para el empleador, tal como se ha implementado en este proyecto. Otros artículos de este decreto no son aplicables directamente al presente trabajo.

# Presupuesto

## 13. Presupuesto

Todo proyecto implica un coste, por lo que este capítulo se dedica a detallar los gastos involucrados. Para el desglose, se consideran tanto el tiempo de uso del material informático y los softwares empleados, como las horas dedicadas por el realizador y las consultas a los docentes, además del beneficio empresarial que debe suponer un estudio de este calibre para una empresa que lo realice.

### 13.1. Cálculo de los costes unitarios

Dado que los equipos informáticos se deprecian con el tiempo, es necesario calcular el coste de amortización. Además, las licencias de los softwares informáticos se detallan de forma anual, por lo que deben expresarse en coste por hora para realizar una estimación precisa del presupuesto.

#### 13.1.1. Activos físicos

Primero, se establece la Ecuación 13.1 para calcular el coste de amortización.

$$A = \frac{VC - VR}{n} \quad (13.1)$$

donde  $A$  es la amortización anual en euros,  $VC$  es el valor de compra en euros,  $VR$  es el valor residual al final del periodo de amortización en euros, y  $n$  es el número de años de amortización.

Para obtener una estimación en euros por hora, se utiliza la Ecuación 13.2.

$$th = \frac{A}{hao} \quad (13.2)$$

donde  $th$  es la amortización en euros por hora,  $A$  es la amortización anual en euros y  $hao$  es el tiempo en horas de trabajo anual. Para estimar este último valor, se considera una media de 30 horas de trabajo semanal, que corresponde a 1560 horas al año.

#### Material informático

Se enumeran los diferentes equipos informáticos utilizados para el desarrollo del proyecto y se calcula  $th$  para cada uno de ellos.

**Ordenador portátil personal:** Utilizado en la mayoría de las fases, excepto en la simulación, el ordenador personal tiene las siguientes características:

- Modelo: MSI GL63 8RD
- Procesador: i7-10710U CPU
- RAM: 32 GB
- SSD: 1 TB

El precio de compra es de 990€, con un periodo de amortización de 5 años y una depreciación del 35 %. Usando la Ecuación 13.1, se obtiene una amortización de 168.8 €/año. Convertido a unidades de hora mediante la Ecuación 13.2, se obtiene 0.11 €/hora.

**Estación de cálculo Rigel:** El precio de compra de la estación de cálculo Rigel es aproximadamente 5000€. Funciona todo el año, con un valor residual del 25 % y un periodo de amortización de 10 años. Con estos valores, la amortización es de 375 €/año, lo que se traduce en 0.04 €/hora.

### 13.1.2. Softwares

Este apartado considera el coste de todos los programas informáticos empleados en euros por hora.

**OpenFOAM®:** Todas las versiones son de código abierto, por lo que su coste por hora es 0€/hora.

**ParaView®:** Al igual que el anterior, es un software de licencia abierta, por lo que su coste es 0€/hora.

**Microsoft®Office 365:** La licencia anual del paquete es de 69€/año, lo que corresponde a 0.04 €/hora.

**Overleaf:** La plataforma online de texto LATEX es gratuita, por lo que el coste es 0€/hora.

## 13.2. Lugar de trabajo

El trabajo ha sido realizado de forma semipresencial, utilizando las instalaciones de la Universidad Politécnica de València y la propia casa del autor, por lo que los costes asociados no son relevantes y no se desglosan aquí.

### 13.2.1. Coste del personal

El coste asociado a la ayuda prestada por los docentes o doctorandos, así como el propio tiempo empleado por el alumno, se detalla a continuación.

**Becario:** El becario ha realizado aproximadamente 600 horas. Además, al ser beneficiario de una beca de colaboración del ministerio, se añade este valor como un coste del proyecto. La beca es de 2000€ anuales, por lo que el coste unitario por hora es 3.33 €/hora.

**Ingeniero Senior:** La ayuda de los Ingenieros Senior se contabiliza aproximadamente al salario neto encontrado en la web. Teniendo en cuenta las horas de trabajo, se estima un coste de 33€/hora.

**Ingeniero Junior:** En algunas fases del proyecto, se ha recurrido a la ayuda de Ingenieros Junior del departamento. Considerando las horas de trabajo y el salario, se aproxima un coste de 12€/hora.

### 13.3. Presupuesto total

Una vez que se han contabilizado todos los gastos por coste unitario, es trivial realizar el cálculo del presupuesto total conociendo las horas de uso de cada ítem. Además, se debe tener en cuenta el valor del Impuesto sobre el Valor Añadido (I.V.A.) del 21 % una vez se hayan calculado todos los costes.

El beneficio empresarial se añade como un porcentaje sobre los costes totales del proyecto. Para este proyecto, asumimos un porcentaje de beneficio empresarial del 15 %.

El resumen general del presupuesto queda expuesto en la Tabla 16.

Concepto	Precio unitario	Horas	Importe
<b>Material informático</b>			
MSI Prestige 15	0.11€/h	600h	66€
Estación de cálculo	0.04€/h	750h	30€
<b>Total</b>			96€
<b>Softwares</b>			
OpenFOAM	0€/h	1000h	0€
ParaView	0€/h	50h	0€
Microsoft Office 365	0.04€/h	5h	0.20€
Overleaf	0€/h	100h	0€
<b>Total</b>			0.20€
<b>Coste del personal</b>			
Estudiante universitario	3.33€/h	600h	1998€
Docentes	33€/h	10h	330€
Doctorando	12€/h	15h	180€
<b>Total</b>			2508€
<b>Subtotal</b>			2700.2€
<b>Beneficio Empresarial</b>			405.03€
<b>IVA (21 %)</b>			652.09€
<b>Total con IVA</b>			3757.33€

Tabla 16: Resumen general del presupuesto

# Bibliografía

## 14. Bibliografía

### Referencias

- [1] John D. Anderson. *Computational Fluid Dynamics: The Basics With Applications*. 1995.
- [2] CFD Direct: User Guide OpenFOAM. 2023. <https://doc.cfd.direct/openfoam/user-guide-v10/index>.
- [3] CFD Online Wiki. 2023. [https://www.cfd-online.com/Wiki/Main\\_Page](https://www.cfd-online.com/Wiki/Main_Page).
- [4] Pedro Martí Gómez-Aldaraví y Roberto García Navarro. “Tema 10 Introducción a la turbulencia; Ampliación de Mecánica de Fluidos”. 2022.
- [5] Pedro Martí Gómez-Aldaraví y Roberto García Navarro. “Tema 8 Aspectos numéricos y resolución en CFD; Ampliación de Mecánica de Fluidos”. 2022.
- [6] Christopher J. Greenshields y Henry G. Weller. *Notes on Computational Fluid Dynamics: General Principles*. CFD Direct, abr. de 2022.
- [7] Tobias Holzmann. *MATHEMATICS, NUMERICS, DERIVATIONS AND OPEN-FOAM®*. 2022. <http://www.holzmann-cfd.de>.
- [8] Global Monitoring Laboratory. Trends in Atmospheric Carbon Dioxide. Jun. de 2023. <https://gml.noaa.gov/ccgg/trends/>.
- [9] Normativa de Trabajos Fin de Grado Universitat Politècnica de València. 2023. <http://www.upv.es/entidades/SA/mastersoficiales/U0921722.pdf>.
- [10] OpenFOAM: User Guide. 2023. <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide>.
- [11] Post-processing command line interface. <https://doc.cfd.direct/openfoam/user-guide-v6/post-processing-cli>.
- [12] “Real Decreto 488/1997, de 14 de abril, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas de visualización.” En: 1997. <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-1997-8671>.
- [13] “Real Decreto 822/2021, de 28 de septiembre, por el que se establece la organización de las enseñanzas universitarias y del procedimiento de aseguramiento de su calidad.” En: 2021. <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2021-15781>.
- [14] “Real Decreto-ley 10/2021, de 9 de julio, de trabajo a distancia.” En: 2021. <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=BOE-A-2021-11472>.
- [15] Jurij Sodja y Rudolf Podgornik. *Turbulence models in CFD*. 2007.
- [16] H K Versteeg y W Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics Second Edition*. 2007. <https://www.pearsoned.co.uk/versteeg>.
- [17] Openfoam Wiki. simpleFoam. Sep. de 2022. <https://openfoamwiki.net/index.php/SimpleFoam>.

- [18] Woldynamics. *Tips and tricks in OpenFOAM®*. 2019.
- [19] Rubén García Ferrer. *Modelado del flujo de aire en un quemador gaseoso mediante dinámica de fluidos computacional*. 2023.
- [21] Raul Payri, José María García Oliver, Pedro Marti Gómez-Aldavari, Elkin Ramirez-Correa. *Experimental evaluation of a premixed swirl-stabilized gas burner with a focus on mixture stratification*. ASME TurboExpo 2024.
- [22] H. JASAK, H.G. WELLER AND A.D. GOSMAN. *HIGH RESOLUTION NVD DIFFERENCING SCHEME FOR ARBITRARILY UNSTRUCTURED MESHES*. 1999.