



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Implementación y validación de un modelo de dos  
ecuaciones para la predicción de hollín en quemadores de  
turbinas de gas

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Aeroespacial

AUTOR/A: Ruiz Fernández, Cristina

Tutor/a: García Oliver, José María

CURSO ACADÉMICO: 2022/2023

Universidad Politécnica de Valencia

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO

IMPLEMENTACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN  
MODELO DE DOS ECUACIONES PARA LA  
PREDICCIÓN DE HOLLÍN EN QUEMADORES  
DE TURBINAS DE GAS

*Grado en Ingeniería Aeroespacial*

Trabajo Final De Grado

AUTORA: Cristina Ruiz Fernández      [cruifer@etsid.upv.es](mailto:cruifer@etsid.upv.es)

TUTOR: José María García Oliver

CO-TUTOR: Iván Olmeda Ramiro

17 de julio de 2023



*Qué maravilloso es que nadie tenga que esperar ni un segundo  
para empezar a mejorar el mundo - Anna Frank*



# Agradecimientos

Gracias a José María y José Manuel por guiarme en este nuevo paso en mi carrera. Gracias a Leo por su implicación y toda la ayuda que nos ha dado desde un primer momento y al CMT por la oportunidad. Gracias en especial a Iván, por su paciencia aguantándome todos los días de los últimos meses, mis mil preguntas y dos mil errores, por ayudarme a solucionar cada uno de ellos y enseñarme a ir siempre más allá.

Gracias a todos y cada uno de los profesores que han creído en mí, que han visto algo especial y que han intentado que yo lo vea también, gracias a vosotros he podido llegar a donde estoy.

Gracias a lo más grande que me ha dado la carrera, mis niños, por desquiciarse conmigo siempre por todo, reír cuando era la única opción y *cagarse en el puto \*\*\*\** cuando era necesario. Habéis sido mi risa diaria y mi apoyo incondicional estos cuatro años y, aunque al principio totalmente inesperado, sois lo que más voy a echar de menos.

Gracias a vosotras también, a mi parte femenina, a mi chat de confesiones y de llantos, de tantos llantos. Gracias por estar ahí siempre que era necesario, por no fallar nunca. Solo nosotras sabemos todo lo que hemos aguantado, y yo no podría, ni querría, haberlo hecho sin vosotras.

Por otro lado, gracias a mis niñ@s, a mi pilar base, las que no fallan, las de toda la vida y para toda la vida. Cada una con un camino tan distinto, pero siempre ayudándonos a crecer. Gracias por escucharme cuando no sabíais de que os hablaba, gracias por creer en mi a ciegas, y por ponerme velitas cuando no tenía esperanza. Gracias por ser como sois conmigo, y gracias por dejarme ser con vosotras.

Y el último no podía faltar. Gracias a ti, por no fallar nunca, por estar cuando ni yo estaba, y creer cuando ni yo creía. Gracias por hacerme mejor persona día a día y enseñarme lo que es compartir. Iniciamos nueva aventura, una de las muchas que nos quedan. Gracias por ser como eres, gracias por ser mi mejor compañía y por hacerme sentirme siempre tan especial.

Gracias a todos por ayudarme a abrirme camino en un mundo liderado por hombres, y no hundirme porque me llamen "la chica de clase". Como dijo Amelia Earhart: *Nada puede detener a una mujer decidida a alcanzar sus sueños y hacer historia.*

**Gracias por convertirme entre todos en una mujer de alas, no de jaulas.**



# Resumen

El proceso de formación de hollín ocurre en una gran cantidad de sistemas de combustión, tanto con combustibles de origen fósil como renovable, cuando se dan condiciones locales de dosados ricos y altas temperaturas. El hollín suele ser un precursor de las partículas, cuya emisión a la atmósfera suele estar limitada para mitigar sus efectos nocivos. La predicción de la formación de hollín en quemadores de turbinas de gas es de gran interés para poder obtener sistemas propulsivos o de generación de electricidad más respetuosos con el medio ambiente. Para ello, se pueden desarrollar diferentes modelos, siendo de gran interés aquellos que pueden ser integrados en herramientas de dinámica de fluidos computacional (CFD).

El presente trabajo fin de grado aplicará el modelado de hollín mediante un modelo de dos ecuaciones implementado en *flamelets* laminares, con el objetivo de crear una tabulación del estado termoquímico que posteriormente se puede integrar en un código CFD para resolver las condiciones locales de formación de hollín en sistemas de combustión reales. El trabajo de fin de grado comenzará con un resumen de los conceptos básicos de combustión necesarios para la comprensión del modelo a tratar durante el proyecto. A continuación se optimizará el flujo de trabajo de la herramienta LFLAM, modelo de combustión basado en *flamelets* creado por el CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas) y empleado por el Instituto CMT-Motores Térmicos. En esta misma herramienta se ha incluido un modelo de predicción de hollín de 2 ecuaciones con 5 submodelos diferentes basados en diferentes tesis y experimentos de la bibliografía. Se realizará un trabajo de validación de los cálculos numéricos de LFLAM comparando cada uno de los submodelos de hollín con datos experimentales, con el fin de seleccionar el que mejor representa la realidad. En una etapa posterior, se llevará a cabo un proceso de tabulación para la integración del modelo de hollín en el software CFD Alya, desarrollado por el Centro de Supercomputación de Barcelona. Finalmente, este trabajo concluirá con el cálculo de un caso sencillo en CFD con la implementación de los cálculos de hollín realizados en LFLAM con el fin de corroborar la exactitud del modelo y la validez de la implementación.





# Abstract

The process of soot formation occurs in a wide range of combustion systems, both with fossil and renewable fuels, when local conditions of rich fuel-air mixtures and high temperatures are present. Soot is often a precursor to particulate matter, the emission of which is typically regulated to mitigate its harmful effects. Predicting soot formation in gas turbine burners is of great interest in order to develop propulsion systems or electricity generation systems that are more environmentally friendly. Different models can be developed for this purpose, with particular interest in those that can be integrated into computational fluid dynamics (CFD) tools.

This final degree project will apply soot modeling using a two-equation model implemented in laminar flamelets, with the aim of creating a tabulation of the thermochemical state that can be subsequently integrated into a CFD code to solve the local conditions of soot formation in real combustion systems. The project will begin with an overview of the fundamental concepts of combustion necessary for understanding the model to be addressed. Subsequently, the workflow of the LFLAM tool will be optimized. LFLAM is a combustion model based on flamelets created by CIEMAT (Center for Energy, Environmental and Technological Research) and used by the CMT-Motores Térmicos Institute. Within this tool, a two-equation soot prediction model with five different submodels based on various theses and experiments from the literature has been included. A validation study of the numerical calculations performed by LFLAM will be conducted, comparing each of the soot submodels with experimental data in order to select the one that best represents reality. In a subsequent stage, a tabulation process will be carried out to integrate the soot model into the CFD software Alya, developed by the Barcelona Supercomputing Center. Finally, this project will conclude with the calculation of a simple case in CFD, implementing the soot calculations performed in LFLAM to verify the accuracy of the model and the validity of the implementation.



# Resum

El procés de formació de sutge ocorre en una gran quantitat de sistemes de combustió, tant amb combustibles d'origen fòssil com renovable, quan es donen condicions locals de dosats rics i altes temperatures. El sutge sol ser un precursor de les partícules, les quals sovint tenen les seues emissions a l'atmosfera limitades per mitigar els seus efectes perjudicials. La predicció de la formació de sutge en cremadors de turbines de gas és de gran interès per a poder obtenir sistemes propulsius o de generació d'electricitat més respectuosos amb el medi ambient. Per a això, es poden desenvolupar diferents models, sent d'especial interès aquells que poden ser integrats en eines de dinàmica de fluids computacional (CFD).

El present treball de fi de grau aplicarà el modelatge de sutge mitjançant un model de dues equacions implementat en flamelets laminars, amb l'objectiu de crear una tabulació de l'estat termoquímic que posteriorment es pot integrar en un codi CFD per a resoldre les condicions locals de formació de sutge en sistemes de combustió reals. El treball de fi de grau començarà amb un resum dels conceptes bàsics de combustió necessaris per a comprendre el model a tractar durant el projecte. A continuació, s'optimitzarà el flux de treball de l'eina LFLAM, model de combustió basat en flamelets creat pel CIEMAT (Centre d'Investigacions Energètiques, Mediambientals i Tecnològiques) i emprat per l'Institut CMT-Motores Tèrmics. En aquesta mateixa eina s'ha inclòs un model de predicció de sutge de dues equacions amb 5 submodels diferents basats en diferents tesis i experiments de la bibliografia. Es realitzarà un treball de validació dels càlculs numèrics de LFLAM comparant cadascun dels submodels de sutge amb dades experimentals, amb la finalitat de seleccionar el que millor representa la realitat. En una etapa posterior, es durà a terme un procés de tabulació per a la integració del model de sutge en el software CFD Alya, desenvolupat pel Centre de Supercomputació de Barcelona. Finalment, aquest treball conclourà amb el càlcul d'un cas senzill en CFD amb la implementació dels càlculs de sutge realitzats en LFLAM amb la finalitat de corroborar l'exactitud del model i la validesa de la implementació.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>15</b>
1.1. Estado del arte . . . . .	17
1.2. Motivación . . . . .	18
1.3. Objetivos . . . . .	19
<b>2. Fundamentos teóricos</b>	<b>21</b>
2.1. Quemadores de turbinas de gas: características y desafíos . . . . .	21
2.2. Combustión: conceptos básicos y modelado . . . . .	25
2.2.1. Llamas premezcladas . . . . .	26
2.2.2. Llamas de difusión . . . . .	28
2.2.3. Modelado de la combustión . . . . .	33
2.3. Fenomenología y modelado de hollín . . . . .	37
2.3.1. Formación de hollín . . . . .	37
2.3.2. Modelado del hollín . . . . .	39
<b>3. Herramientas y metodología</b>	<b>43</b>
3.1. Planteamiento de modelado . . . . .	44
3.2. Herramientas . . . . .	45
3.2.1. LFLAM . . . . .	45
3.2.2. CFD . . . . .	52
3.2.3. MATLAB y ParaView . . . . .	55
3.3. Metodología: Optimización del flujo de trabajo de la herramienta LFLAM . . . . .	57
3.3.1. Preparación de casos . . . . .	58
3.3.2. Cálculo . . . . .	65
3.3.3. Postprocesado . . . . .	69
<b>4. Validación del modelo de predicción de hollín</b>	<b>73</b>
4.1. Metodología de validación . . . . .	73

4.1.1.	Casos experimentales de validación . . . . .	74
4.1.2.	Correcciones numéricas . . . . .	76
4.2.	Comparación de las predicciones de hollín con experimentos . . . . .	80
4.2.1.	Validación de la fase gas . . . . .	80
4.2.2.	Validación de la predicción de hollín . . . . .	86
4.2.3.	Resultados llama Gleason . . . . .	88
4.2.4.	Resultados llama WRC15 . . . . .	90
4.3.	Selección del submodelo más preciso y representativo . . . . .	93
4.3.1.	Estudio de sensibilidad de los resultados . . . . .	94
<b>5.</b>	<b>Tabulación e integración en el software CFD Alya</b>	<b>97</b>
5.1.	Proceso de tabulación del estado termoquímico . . . . .	98
5.1.1.	Estructura de las tablas . . . . .	98
5.1.2.	Estrategia de tabulación de <i>flamelets</i> de difusión . . . . .	101
5.1.3.	Interacción química-turbulencia . . . . .	102
5.2.	Integración del modelo en el software Alya . . . . .	103
5.3.	Evaluación del modelo y validación de la implementación . . . . .	104
5.3.1.	Caso de estudio en CFD utilizando el modelo implementado . . . . .	104
5.3.2.	Análisis de los resultados y comparación con datos experimentales . . . . .	107
5.3.3.	Discusión de la exactitud del modelo y validez de la implementación . . . . .	114
<b>6.</b>	<b>Conclusiones y trabajos futuros</b>	<b>117</b>
6.1.	Resumen de los hallazgos y logros alcanzados . . . . .	117
6.2.	Limitaciones y posibles trabajos futuros . . . . .	118
<b>7.</b>	<b>Pliego de condiciones</b>	<b>121</b>
7.1.	Introducción . . . . .	121
7.2.	Condiciones generales de seguridad en los lugares de trabajo . . . . .	121
7.3.	Orden, limpieza y mantenimiento . . . . .	122
7.4.	Condiciones ambientales de los lugares de trabajo . . . . .	123
7.5.	Iluminación de los lugares de trabajo . . . . .	123
7.6.	Servicios higiénicos y locales de descanso . . . . .	123
7.7.	Material y locales de primeros auxilios . . . . .	123
7.8.	Sobre el impacto de la huella de carbono . . . . .	124

<b>8. Presupuesto</b>	<b>125</b>
8.1. Introducción . . . . .	125
8.2. Costes unitarios . . . . .	125
8.3. Desglose de costes . . . . .	126
8.4. Coste total . . . . .	128
8.5. Beneficio económico . . . . .	129
<b>A. Código 1 Postprocesado</b>	<b>135</b>
<b>B. Código 2 Postprocesado</b>	<b>141</b>
<b>C. Código 3 Postprocesado</b>	<b>147</b>
<b>D. <i>Script</i> de graficado</b>	<b>155</b>
<b>E. Código cálculo rama <i>Upper</i></b>	<b>161</b>
<b>F. Gráficas Validación Modelo Hollín</b>	<b>167</b>
F.1. Resultados a 0.101MPa . . . . .	167
F.2. Resultados a 0.405MPa . . . . .	169
F.3. Resultados a 0.811MPa . . . . .	170
<b>G. Código 1 Tabulación - Laminar</b>	<b>171</b>
<b>H. Código 2 Tabulación - Turbulenta</b>	<b>183</b>





# Índice de figuras

1.1. Diagrama de emisiones por sector [1] . . . . .	15
1.2. ODS implicados en este trabajo . . . . .	16
2.1. Diagrama de funcionamiento de un turborreactor [10] . . . . .	22
2.2. Quemadores anulares [12] . . . . .	23
2.3. Temperatura y NO en función del ratio aire/combustible [16] . . . . .	27
2.4. Estructura de una llama de difusión [18] . . . . .	29
2.5. Llama de difusión laminar en configuración contrapuesta [19] . . . . .	29
2.6. Dependencia de la llama de difusión con el estiramiento [18] . . . . .	30
2.7. Isosuperficie de la fracción de mezcla estequiométrica en una llama de difusión [19] . . . . .	32
2.8. Número de especies y reacciones químicas incluido en diferentes mecanismos cinéticos [10] . . . . .	36
2.9. Procesos físicos y químicos para la formación del hollín [4] . . . . .	37
2.10. Mecanismos de crecimiento de hollín [22] . . . . .	39
3.1. <i>Workflow</i> del proyecto . . . . .	45
3.2. Evolución de la temperatura frente al SR para una fracción de mezcla estequiométrica $Z_{st}$ . . . . .	55
3.3. Flujo de trabajo alrededor de LFLAM . . . . .	58
3.4. Contenido del archivo <i>control.C2H4</i> . . . . .	59
3.5. Contenido de las primeras líneas del archivo <i>C2H4.inp</i> . . . . .	60
3.6. <i>Problem definition</i> en el archivo <i>C2H4.inp</i> . . . . .	61
3.7. <i>Boundary Conditions</i> en el archivo <i>C2H4.inp</i> . . . . .	62
3.8. <i>Solver Parameters</i> en el archivo <i>C2H4.inp</i> . . . . .	64
3.9. Impresión por consola al iniciar el cálculo . . . . .	65
3.10. Impresión por consola de los residuales . . . . .	66
3.11. Impresión por consola del fin del primer refinado . . . . .	67
3.12. Impresión por consola del fin de cálculo . . . . .	68
3.13. Archivo <i>bash</i> para iniciar el cálculo . . . . .	71
3.14. Jeralquía final carpetas para el correcto cálculo . . . . .	72

4.1. Comparativa perfil de temperatura Plug Flow vs Potential Flow a diferentes SR (1/s)	77
4.2. Comparativa perfil de temperatura Plug Flow vs Potential Flow SR=101.25 (1/s)	77
4.3. Comparativa perfil de temperatura en LFLAM vs experimental	78
4.4. Comparativa perfil de temperatura en LFLAM vs experimental tras la corrección del desplazamiento espacial	79
4.5. Comparativa especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.101MPa 2013K	80
4.6. Comparativa agrupada especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.101MPa 2013K	81
4.7. Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM vs experimental 0.101MPa 2013K	81
4.8. Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM con difusión multi-componente vs experimental 0.101MPa 2013K	82
4.9. Comparativa especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.405MPa 1826K	83
4.10. Comparativa agrupada especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.405MPa 1826K	83
4.11. Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM vs experimental 0.405MPa 1826K	84
4.12. Comparativa especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.811MPa 1696K	85
4.13. Comparativa agrupada especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.811MPa 1696K	85
4.14. Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM vs experimental 0.811MPa 1696K	86
4.15. Resultados hollín 1 atm 2013K	88
4.16. Resultados hollín 1 atm 2207K	88
4.17. Resultados hollín 4 atm 1875K	89
4.18. Resultados hollín 4 atm 2016K	89
4.19. Resultados hollín 8 atm 1809K	90
4.20. Resultados hollín 8 atm 1914K	90
4.21. Resultados hollín llama WRC 15	91
4.22. Resultados modificación sub.1 1 atm. 2013K	94
4.23. Resultados modificación sub.1 1 atm. 2207K	95
4.24. Resultados modificación sub.1 WRC15	95
5.1. Tabla laminar de propiedades para Alya	98
5.2. Tabla laminar de escalado para Alya	98
5.3. Tabla laminar de términos fuente para Alya	99
5.4. Tabla laminar de términos fuente con soot para Alya	99
5.5. Tabla laminar de especies para Alya	99

5.6. Inicio común archivos tabulación . . . . .	100
5.7. Configuración caso WRC15 . . . . .	105
5.8. Malla caso WRC15. Distancias en $m$ . . . . .	105
5.9. Malla en detalle caso WRC15. Distancias en $m$ . . . . .	106
5.10. Contorno de velocidad. Distancias en $m$ . . . . .	107
5.11. Contorno de fracción de mezcla. Distancias en $m$ . . . . .	108
5.12. Contorno de temperatura. Distancias en $m$ . . . . .	108
5.13. Contorno de variable de progreso. Distancias en $m$ . . . . .	109
5.14. Contorno de $Y_{OH}$ . Distancias en $m$ . . . . .	109
5.15. Contorno de $Y_{O_2}$ . Distancias en $m$ . . . . .	110
5.16. Contorno de $Y_{C_2H_4}$ . Distancias en $m$ . . . . .	110
5.17. Contorno de $Y_{CO_2}$ . Distancias en $m$ . . . . .	111
5.18. Contorno de $Y_{H_2O}$ . Distancias en $m$ . . . . .	111
5.19. Contorno de $Y_{CO}$ . Distancias en $m$ . . . . .	112
5.20. Contorno de $Y_{C_2H_2}$ . Distancias en $m$ . . . . .	112
5.21. Contorno de $Y_{A_4}$ . Distancias en $m$ . . . . .	112
5.22. Contorno de $N_S$ . Distancias en $m$ . . . . .	113
5.23. Contorno de $SVF$ . Distancias en $m$ . . . . .	113
5.24. Análisis implementación T(K) vs X(cm) para cada dato calculado . . . . .	114
5.25. Análisis implementación NS(1/cm <sup>3</sup> ) vs X(cm) para cada dato calculado . . . . .	115
5.26. Análisis implementación SVF(-) vs X(cm) para cada dato calculado . . . . .	116
F.1. Resultados hollín 1 atm 2063K . . . . .	167
F.2. Resultados hollín 1 atm 2113K . . . . .	168
F.3. Resultados hollín 1 atm 2160K . . . . .	168
F.4. Resultados hollín 4 atm 1923K . . . . .	169
F.5. Resultados hollín 4 atm 1970K . . . . .	169
F.6. Resultados hollín 8 atm 1862K . . . . .	170



# Índice de tablas

2.1. Mecanismos cinéticos químicos usados para el modelado de la formación de hollín en llamas laminares . . . . .	36
3.1. Reacciones consideradas para el hollín . . . . .	48
3.2. Resumen constantes para los diferentes modelos de soot implementados en LFLAM . .	52
4.1. Temperatura máxima de llama calculada y condiciones de contorno del experimento de Gleason. Remarcados los casos de los que se tomaron mediciones de hollín . . . . .	75
4.2. Temperatura máxima de llama calculada y condiciones de contorno del experimento WRC15 . . . . .	76
4.3. Resumen constantes para los diferentes modelos de soot implementados en LFLAM (II)	87
7.1. Huella de carbono producida por la realización del Trabajo de Final de Grado . . . . .	124
8.1. Costes totales por licencias . . . . .	127
8.2. Costes totales por personal . . . . .	127
8.3. Costes totales por electricidad . . . . .	128
8.4. Costes totales por material . . . . .	128
8.5. Coste total del proyecto . . . . .	129
8.6. Coste y beneficio total del proyecto . . . . .	129



# Nomenclatura

$\dot{Q}_{s,i}$	Tasa de producción de la fracción másica de hollín en la sección dada [ $s^{-1}$ ]
$\dot{q}_{s,i}$	Tasa de producción de la fracción másica de hollín [ $m^3 kg^{-1} s^{-1}$ ]
$\nabla$	Gradiente
$\rho$	Densidad [ $\frac{kg}{m^3}$ ]
$\tilde{\omega}_X$	Tasa de generación de X [ $\frac{kg}{cm^3 s}$ ]
$A_x$	Aromáticos
$C_a$	Constante de aglomeración [-]
$C_s$	Partículas de hollín
$C_x H_y$	Hidrocarburos
$CO_2$	Dióxido de carbono
$N_s$	Number Density [ $part/cm^3$ ]
$NO_X$	Óxidos de nitrógeno
$Re_t$	Número de Reynolds turbulento [-]
$SO_x$	Óxidos de azufre
$t_{mix}$	Tiempo característico de mezclado de combustible
$V_s$	Velocidad termoforética [ $\frac{m}{s}$ ]
$Y_C$	Fracción másica de carbono [-]
$Y_j$	Fracción másica [-]
$Y_s$	Fracción másica de hollín [-]

BSC	Centro de Supercomputación de Barcelona
C	Carbono
CFD	Computational Fluid Dynamics
CIEMAT	Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas
CO	Monóxido de carbono
Da	Número de Damköhler [-]
DAC	Combustor anular doble
E	Energía de activación [J/kg]
FGM	Flamelet Generated Manifolds
H	Hidrógeno
HACA	Adición de acetileno por abstracción de hidrógeno
ISAT	In-situ adaptive tabulation
KM2	KAUST PAH Mechanism 2
Le	Número de Lewis
Nd:YAG	Láser de granate de itrio y aluminio dopado con impurezas de neodimio
O	Óxigeno
ODS	Objetivos de Desarrollo Sostenible
OPR	Relación global de compresión
Pa	Pascales
PAH	Hidrocarburos aromáticos policíclicos
R	Constante de los gases ideales [ $\frac{J}{mol K}$ ]
RQL	Rich-Burn Quick-Quench Lean-Burn
SAC	Combustores anulares simples
SR	Strain Rate



SVF	Fracción volumétrica de hollín [-]
T	Temperatura [K]
X	Distancia [ <i>m</i> ]
Z	Fracción de mezcla [-]



# Capítulo 1

## Introducción

En la actualidad, el sector del transporte desempeña un papel fundamental en la economía global y en la conectividad de las sociedades. Sin embargo, el crecimiento continuo del transporte, especialmente el aumento significativo en el uso de la aviación, plantea desafíos importantes en términos de sostenibilidad y medio ambiente.

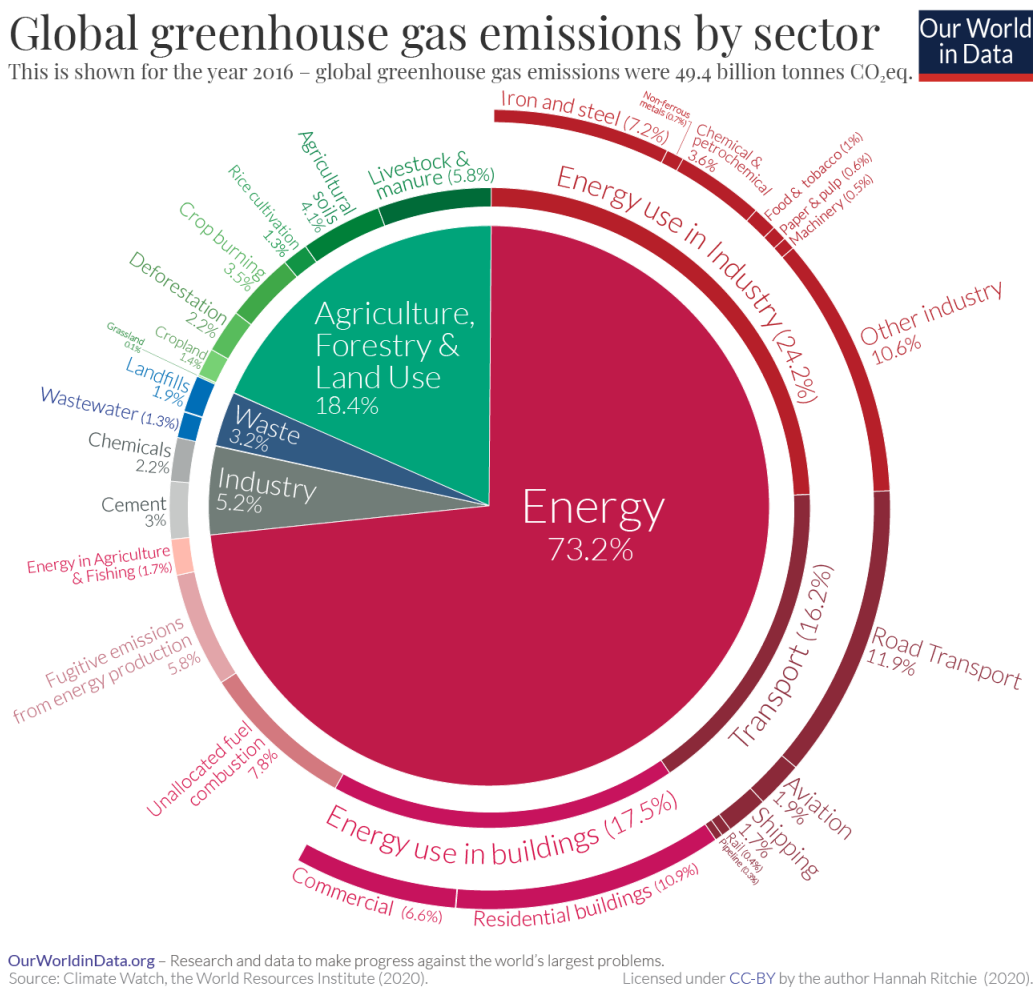


Figura 1.1: Diagrama de emisiones por sector [1]

Tal y como se puede apreciar en la Figura 1.1, el 16.2% de las emisiones de efecto invernadero provienen del sector transporte. En este contexto, es crucial abordar estos desafíos y trabajar hacia soluciones que permitan un transporte más sostenible y respetuoso con el medio ambiente.

El desarrollo sostenible y la mitigación del cambio climático son prioridades globales establecidas por los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de las Naciones Unidas. Estos objetivos buscan promover un desarrollo económico y social equitativo, al tiempo que se protege el medio ambiente y se abordan los desafíos ambientales. En relación con el sector del transporte, los ODS relevantes incluyen el ODS 7 (Energía asequible y no contaminante) y el ODS 13 (Acción por el clima), mostrados en las Figuras 1.2a y 1.2b.



(a) ODS 7: Energía asequible y no contaminante [2]



(b) ODS 13: Acción por el clima [3]

Figura 1.2: ODS implicados en este trabajo

El ODS 7 se centra en garantizar el acceso a una energía asequible, confiable, sostenible y moderna para todos. En el contexto del transporte, esto implica reducir la dependencia de los combustibles fósiles y promover el uso de fuentes de energía más limpias y renovables. La aviación, en particular, es un sector que depende en gran medida de combustibles fósiles, lo que contribuye significativamente a las emisiones de gases de efecto invernadero y al cambio climático. Por lo tanto, abordar la sostenibilidad en la aviación es esencial para avanzar en el cumplimiento del ODS 7.

El ODS 13 se enfoca en tomar medidas urgentes para combatir el cambio climático y sus impactos. El sector del transporte es responsable de una proporción significativa de las emisiones de gases de efecto invernadero a nivel mundial. La aviación en particular emite dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>) y partículas contaminantes, contribuyendo al calentamiento global y a la degradación de la calidad del aire. Por lo tanto, es esencial implementar medidas para reducir las emisiones en el sector del transporte y avanzar hacia prácticas más sostenibles.

En este contexto, el presente trabajo se centra en abordar los desafíos ambientales y la necesidad de un transporte más sostenible, específicamente en el ámbito de la aviación y los quemadores de turbinas de gas. El objetivo principal es desarrollar y validar un modelo de predicción de hollín que permita

comprender y controlar la formación de partículas contaminantes en los quemadores utilizados en la industria de la aviación. Al mejorar la eficiencia y la sostenibilidad de los sistemas de combustión en la aviación, se puede contribuir significativamente a la reducción de las emisiones contaminantes y al logro de los ODS relacionados con la energía y el cambio climático.

Al abordar estos desafíos y trabajar hacia soluciones más sostenibles en el sector del transporte, se podrá avanzar hacia un futuro donde la movilidad sea compatible con la protección del medio ambiente y el desarrollo sostenible.

## 1.1. Estado del arte

El proceso de predicción de hollín es un tema de investigación activo en la actualidad. Hasta hace escasos años era un tema muy desconocido, pero dado el creciente uso de los sistemas de transporte y su incipiente necesidad de sostenibilización, se ha convertido en uno de los principales temas de desarrollo. Concretamente, el hollín es producido en una gran cantidad de motores que empleen un hidrocarburo como combustible, por lo que este es investigado desde varias ramas.

Hasta aproximadamente 2010, tanto la formación como el modelado del hollín eran prácticamente desconocidos, pero a partir de este año hasta la actualidad 2023, su dedicación a la investigación y, consecuentemente, su desarrollo ha sido exponencial.

De forma general, la formación de hollín está comprendida por procesos relacionados primero a una fase gaseosa y luego a una fase sólida. La primera fase está gobernada por reacciones químicas que conllevan a la formación y al crecimiento de moléculas aromáticas, mientras que la segunda está vinculada a interacciones tanto químicas como físicas entre partículas, las cuales originan el crecimiento de la partícula y la formación de agregados de hollín. De forma paralela ocurren también procesos de descomposición, conducidos por la oxidación y la fragmentación tanto de partículas como de agregados de hollín. La mayor incertidumbre está en el estudio de la nucleación de partículas de hollín, en la que aún no hay consenso sobre el mecanismo físico predominante.

Sin embargo, sí que se ha logrado alcanzar un consenso sobre la existencia de 6 procesos que serán explicados en detalle a lo largo de este trabajo. (i) pirólisis, (ii) nucleación, (iii) coalescencia, (iv) crecimiento superficial, (v) agregación y (vi) oxidación, los cuales serán debidamente concretados posteriormente.

Los trabajos más recientes involucrando el modelado de hollín en llamas laminares difusivas están relacionados con el análisis paramétrico de diferentes aspectos como la presión de la llama [4], cantidad de oxidante ([5],[6]), influencia de diluyentes [6], y efecto de agentes reductores como el éter dimetílico [7], un compuesto usado en la industria para la disminución de emisiones de hollín. Además, la influencia en las predicciones de diferentes modelos de transporte y radiación han sido también evaluados [8].

A partir de estos trabajos, y en concordancia con lo indicado en [9], es posible inferir que esfuerzos mayores aún son necesarios para desarrollar modelos detallados de cinética química y de formación de hollín, los cuales permitan predecir adecuadamente las emisiones asociadas a este contaminante crítico.

## 1.2. Motivación

En el campo de la ingeniería de turbinas de gas, la comprensión y predicción precisa de los fenómenos de combustión son de vital importancia para garantizar un rendimiento eficiente y seguro. La formación de hollín durante la combustión es un factor crítico a considerar, ya que puede afectar negativamente tanto la eficiencia del sistema como la vida útil de los componentes. Por lo tanto, es fundamental desarrollar modelos de predicción de hollín confiables y precisos que permitan optimizar el diseño y la operación de las turbinas de gas.

Por otro lado, como se ha dicho previamente, el hollín tiene un impacto significativo en la salud humana y en el medio ambiente. El hollín puede contener cancerígenos y afecta la calidad del aire y la visibilidad. Además, la reducción del hollín siempre ayudará a mejorar y puede mejorar la salud respiratoria al reducir las emisiones de carbono negro. El presente trabajo se centra en la validación e implementación de un modelo de predicción de hollín para turbinas de gas utilizando simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD). El objetivo principal es seleccionar el modelo de predicción de hollín que mejor se ajuste a los datos experimentales y, posteriormente, implementarlo en un entorno CFD para evaluar su rendimiento en un caso de estudio.

La investigación se basa en el uso de la herramienta LFLAM, una herramienta de cálculo de flamelets, que posteriormente se explicará, desarrollado por el Centro de Investigaciones Energéticas Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), y empleado en trabajos de colaboración conjunta por el Instituto CMT- Motores Térmicos, donde se realiza este trabajo de fin de grado. En este contexto, se ha incorporado un modelo de predicción de hollín de 2 ecuaciones con 5 submodelos diferentes basados en estudios previos y experimentos disponibles en la literatura científica. Sin embargo, esta implementación no había sido validada, por lo que era un paso crucial a dar. Además, en el propio desarrollo de la investigación se planteó una de las partes de este trabajo, el desarrollo de un método tabulado para el cálculo CFD con Alya.

Se espera que los resultados obtenidos contribuyan a mejorar la comprensión de los procesos de combustión en estas turbinas y a proporcionar herramientas eficaces para la optimización de su diseño y rendimiento.

### 1.3. Objetivos

El objetivo global de este trabajo es optimizar el flujo de trabajo una herramienta que permita predecir las emisiones de hollín en diferentes configuraciones de quemadores de gas, alcanzando la solución de una forma eficiente, buscando conseguir un resultado lo más preciso posible.

Este trabajo se ha propuesto alcanzar una serie de objetivos interrelacionados que abarcan diferentes aspectos de la investigación. Cada objetivo se centra en aspectos clave que contribuirán al desarrollo y la mejora de la herramienta LFLAM y al avance en la predicción de la formación de hollín en quemadores de turbinas de gas. A continuación, se presentan los objetivos de manera más detallada:

1. Hacer de LFLAM una herramienta fácilmente accesible: El primer objetivo es establecer LFLAM como una herramienta de uso sencillo y accesible. Para lograr esto, se pretende definir una rutina de preprocesado, cálculo y postprocesado que sea lo más automatizada y flexible posible. Esto permitirá a los investigadores y profesionales que utilicen LFLAM adaptarse rápidamente a los cambios en la metodología o las condiciones de estudio, agilizando el proceso de cálculo y facilitando la obtención de resultados precisos.
2. Validar el modelo de dos ecuaciones de hollín implementado en LFLAM: El segundo objetivo se centra en la validación del modelo de predicción de hollín implementado en LFLAM. Para ello, se llevará a cabo una comparación exhaustiva de cada uno de los submodelos de hollín con el fin de identificar aquel que mejor predice la realidad. Esta validación se basará en la comparación de los resultados numéricos obtenidos con datos experimentales de diferentes investigaciones y casos de estudio relevantes. Al seleccionar el submodelo más preciso, se garantizará la fiabilidad y la calidad de las predicciones de formación de hollín en quemadores de turbinas de gas utilizando LFLAM.
3. Tabular la química de las llamas 1D de LFLAM mediante un modelo de combustión FGM e implementar el modelo de dos ecuaciones de hollín: El tercer objetivo se enfoca en la tabulación de la química de las llamas 1D de LFLAM. Para lograr esto, se empleará un modelo de combustión *Flamelet Generated Manifolds* (FGM). Esta tabulación permitirá obtener información detallada sobre el estado termoquímico de las llamas, incluyendo variables como la temperatura, la presión y las fracciones molares de especies químicas. Además, se tabularán ciertos términos necesarios para el cálculo del modelo de predicción de hollín, enriqueciendo así la base de datos y mejorando la precisión de las predicciones.
4. Validar la implementación del modelo de dos ecuaciones de hollín en CFD: El último objetivo se centra en la validación de la implementación del modelo de dos ecuaciones de hollín en un software

de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Este proceso de validación proporciona una evaluación crítica de la precisión y validez de la implementación del modelo en CFD, asegurando su utilidad y aplicabilidad en situaciones prácticas. La validación exitosa de la implementación del modelo en CFD es fundamental para respaldar su uso en estudios más complejos y reales, y proporciona confianza en su capacidad para predecir y controlar la formación de hollín en sistemas de combustión de mayor escala y complejidad.

Al abordar estos objetivos de manera integrada, se espera mejorar la eficiencia y la precisión en la predicción de la formación de hollín en quemadores de turbinas de gas utilizando la herramienta LFLAM. Además, se espera contribuir al avance en la comprensión de los mecanismos de formación de hollín en sistemas de combustión y promover el desarrollo de sistemas más eficientes y respetuosos con el medio ambiente.

El trabajo se estructurará de la siguiente manera: en primer lugar, se presentarán los conceptos básicos de combustión necesarios para comprender el modelo a tratar. A continuación, se llevará a cabo una consolidación del procesado y postprocesado de cálculos numéricos utilizando la herramienta LFLAM. Luego, se procederá a la validación de los cálculos numéricos comparando cada uno de los submodelos de hollín con datos experimentales disponibles. Esta validación permitirá seleccionar el submodelo que mejor represente la realidad.

Una vez validado el modelo de predicción de hollín, se procederá a su implementación en un entorno CFD utilizando la colaboración del Centro de Supercomputación de Barcelona (BSC). Esta implementación se realizará en un caso de estudio sencillo que permitirá evaluar la exactitud del modelo y la validez de su implementación en condiciones reales de operación de una turbina de gas.



## Capítulo 2

# Fundamentos teóricos

### 2.1. Quemadores de turbinas de gas: características y desafíos

A pesar de que las emisiones de hollín pueden darse en todo motor térmico que emplee un hidrocarburo como combustible, el presente trabajo se centra el efecto de este contaminante en las turbinas de gas, el tipo de motor en el que se basan los turborreactores y turbonfans de los aviones comerciales y militares hoy en día.

Un motor de turbina de gas es una turbomáquina térmica que transforma la energía química contenida en el combustible en energía mecánica mediante la expansión de los gases de escape en los álabes de una turbina.

Las turbinas de gas en aviones funcionan de la siguiente manera: el aire de la atmósfera es recogido y fluye a través de un compresor que lo eleva a alta presión y temperatura (y un difusor antes del compresor si lo hay), tras ello, en el quemador o cámara de combustión, se le aporta energía dispersando combustible en el mismo y quemándolo. Así, la combustión genera un flujo de alta temperatura, produciendo una liberación de energía del combustible. Finalmente, el aire pasa por una turbina, que extrae el trabajo requerido por el sistema, principalmente por el compresor, del fluido. Este aire sale tras ello por la tobera, donde es expandido para extraerle la energía restante al fluido y producir una fuerza de reacción en sentido contrario a la salida de estos gases, el empuje. En la Figura 2.1 se puede apreciar el diagrama genérico de funcionamiento de un motor de turbina de gas, el turborreactor.

Además, los quemadores de turbinas de gas en aviones tienen características específicas que los diferencian de los quemadores utilizados en otras aplicaciones.

En primer lugar, los quemadores de turbina de gas en aviones emplean combustibles específicos, como queroseno de aviación, que tienen un alto poder calorífico y una baja viscosidad, y cuya composición será crucial y tendrá plena influencia en la generación de hollín.

Adicionalmente, dada la velocidad a la que inciden los gases en el motor, y a pesar de ser menor la

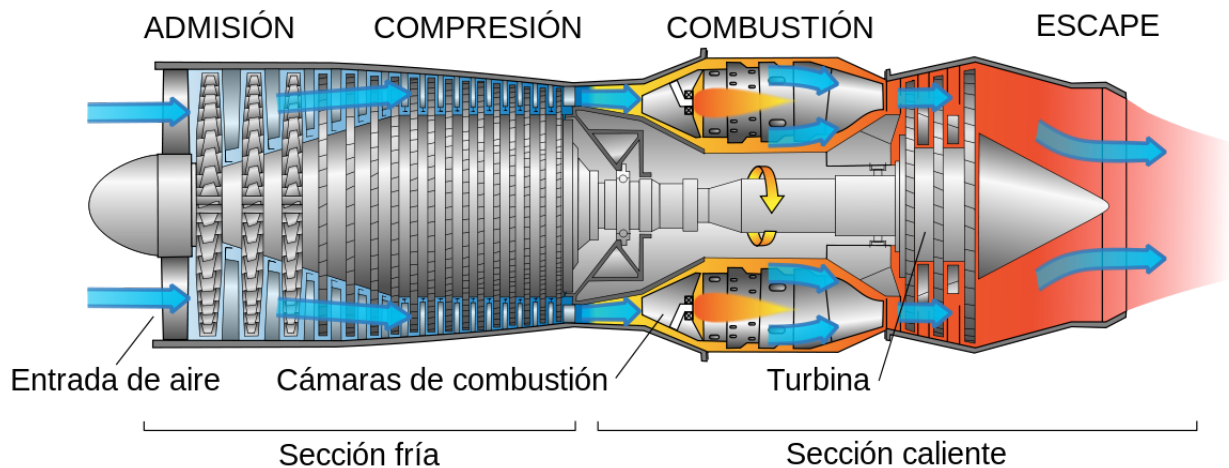


Figura 2.1: Diagrama de funcionamiento de un turborreactor [10]

velocidad con la que alcanza el aire la cámara de combustión, la velocidad de inyección de combustible, ya que se trata de una combustión por difusión, es muy grande.

Por último, destacar que los quemadores de turbinas de gas son máquinas térmicas continuas, no volumétricas, por lo que son mucho más simples de modelar mediante dinámica de fluidos computacional. Esto permite optimizar completamente su diseño y mejorar su eficiencia, así como las emisiones contaminantes.

Los quemadores de turbinas de gas presentan desafíos asociados a la formación de hollín, ya que este se produce en el interior de las cámaras de combustión, como se ha mencionado previamente, en zonas ricas en combustible y altas temperaturas. Es por ello que esta y la formación de otras emisiones contaminantes perjudiciales para la salud son tenidas en cuenta durante el diseño de los quemadores, buscando minimizar sus emisiones mediante la implementación de lo conocido como tecnologías de quemadores de bajas emisiones. Estos quemadores minimizan las emisiones de NO<sub>x</sub> y garantizan el cumplimiento de las normativas regionales e internacionales en esa materia [11]. Estas normas, cada vez más restrictivas, empezaron a aplicarse en los años ochenta, por lo que, desde aquel momento, el diseño optimizado en la reducción de emisiones comenzó a ser una prioridad.

Se empezaron a implementar combustores de bajas emisiones (*Low-Emissions Combustors*) como alternativa a los quemadores convencionales, conocidos como combustores anulares simples (SAC), optimizando tanto el proceso de inyección como la propia combustión. Estos combustores, presentados en la Figura 2.2a estaban caracterizados por realizar una combustión por difusión, concepto que será profundizado en la Sección 2.2. Como se puede ver en la Figura 2.2a los combustores anulares tienen zonas de combustión separadas, un revestimiento continuo y una carcasa en un anillo.

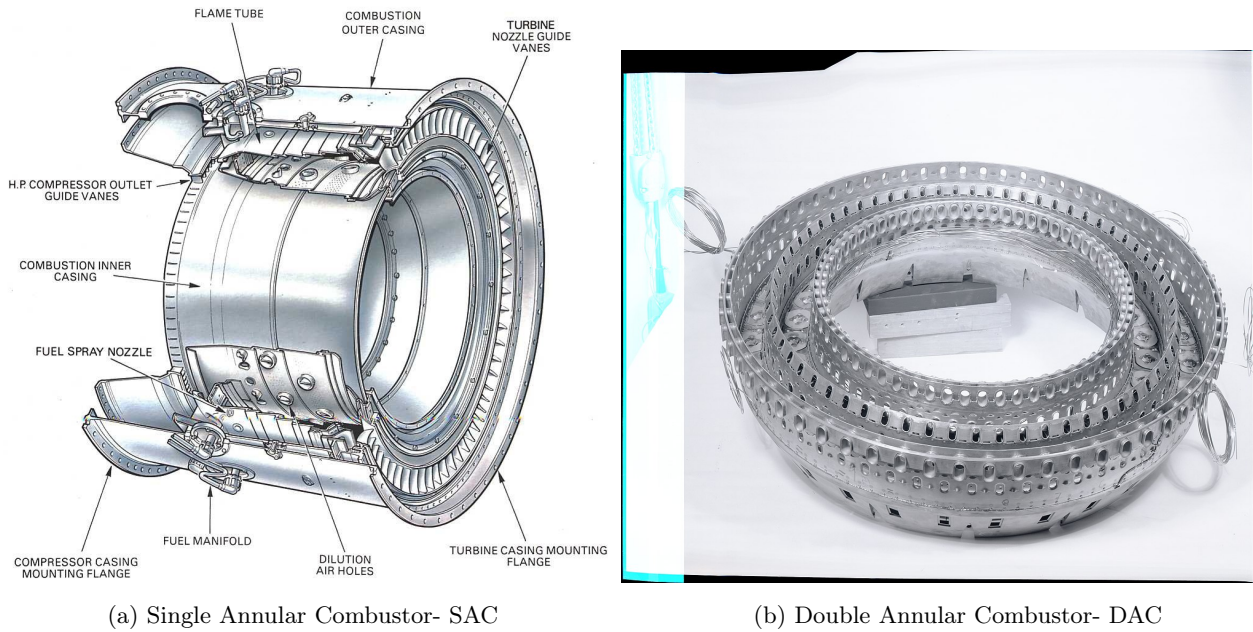


Figura 2.2: Quemadores anulares [12]

Los diseños anulares tienen una combustión más eficiente en la que casi todo el combustible se quema por completo. Sin embargo, se fueron dando nuevas versiones de este quemador caracterizadas por realizar una combustión parcialmente premezclada, concepto que se aclarará también posteriormente. También coexistieron hasta hace escasos años diseños donde en lugar de emplear un único anillo, se usaban dos y era conocido como combustor anular doble (DAC), mostrados en la Figura 2.2b donde de encontraría un anillo dentro del otro anillo inicial. La mayor diferencia es que el combustor tiene dos zonas de combustión alrededor del anillo; una zona piloto y una zona principal. La zona piloto actúa como la de un único combustor anular, y es la única zona que opera a bajos niveles de potencia. A altos niveles de potencia, también se utiliza la zona principal, aumentando el flujo de aire y masa a través del combustor.

Teniendo en cuenta los crecientes requerimientos de potencia demandados por las aeronaves, una de las tendencias tomadas en el diseño de aerorreactores fue el aumento de la relación global de compresión u *OPR* por sus siglas en inglés, pero a la vez la normativa respecto a emisiones es cada vez más restrictiva, por lo que se han tenido que tomar nuevas tecnologías que permitan cumplir ambos requerimientos. Estos nuevos diseños están caracterizados por contar con un alto *swirl*, es decir, movimiento rotatorio del aire alrededor de un eje perpendicular a la cámara de combustión que hace que el aire y el combustible se mezclen mucho más rápido, dando lugar también a las mencionadas combustiones parcialmente premezcladas.

En general, todas las nuevas tecnologías para los quemadores aeroespaciales se han basado en los mismos conceptos, conseguir realizar la combustión en condiciones de dosado pobre, es decir, con más

oxígeno disponible que combustible, haciendo que, tal y como se explicará en el siguiente apartado, la generación de NOx y hollín sea muchísimo menor. Uno de los conceptos más representativos ha sido el *Rich-Burn Quick-Quench Lean-Burn, RQL*. En este quemador la combustión se divide en 3 partes; en primer lugar una parte rica en una primera zona donde no se generan NOx, pero sí CO y hollín. Por otro lado, una segunda zona donde se inyecta aire que permite oxidar estos compuestos no deseados como producto de la combustión dada su peligrosidad. Al pasar de condiciones de dosado rico a pobre, ambas zonas no favorables para la producción de NOx, se atravesará la zona estequiométrica, donde hay la cantidad exacta de combustible y oxidante para quemar, dando la temperatura de combustión más alta que en la zona anterior y siguiente y dando las condiciones idóneas para producir NOx, por lo que se pretende mezclar rápidamente la mezcla rica con el aire para alcanzar las condiciones de dosado pobre. Por último, en la tercera sección con mezcla pobre en combustible se quema la mezcla para consumir por completo los contaminantes mencionados y los hidrocarburos que quedaran sin quemar.

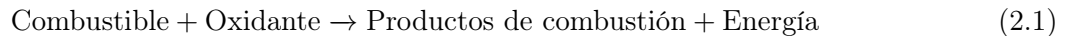
Esta estrategia es la tendencia de los quemadores actuales, inyección de diferentes corrientes de combustible y aire con el fin de alcanzar dosados fuera de la mezcla estequiométrica, donde la producción de los contaminantes sería máxima. Sin embargo, el diseño de estos sistemas es mucho más complejo como cabe esperar. Dada la complejidad de estos quemadores, las llamas formadas y sus aplicaciones, encontrar herramientas que analicen su combustión en tiempos y con costes razonables es muy complicado, y una investigación en gran profundidad se tiene que llevar a cabo.

En resumen, la formación de hollín es un desafío asociado a los quemadores de turbinas de gas, que puede ser minimizado mediante el diseño de quemadores de bajas emisiones, bien implementando tecnologías de combustión más eficientes, bien ajustando la relación aire-combustible o empleando combustibles de alta calidad. Además, el modelado numérico de la formación de hollín puede ser utilizado para mejorar la eficiencia de los sistemas de combustión y disminuir los impactos negativos del hollín en la salud y en el medio ambiente.

## 2.2. Combustión: conceptos básicos y modelado

Se conoce como combustión a la reacción química entre el oxígeno y un agente oxidable, acompañada de desprendimiento de energía y que habitualmente se manifiesta por incandescencia o llama [13].

De forma general, la reacción de combustión sigue la ecuación química básica 2.1:

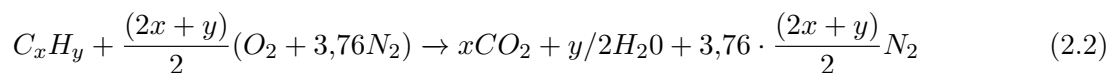


Así pues, al reaccionar ambos reactivos, dan lugar a una cierta cantidad de energía en forma de luz o calor o ambos.

El combustible puede estar en estado sólido, líquido o gaseoso, tratándose comúnmente de hidrocarburos como el gas natural, la gasolina, el carbón...

Por otro lado, el oxidante es el agente que proporciona oxígeno para la reacción, al tratarse en esta aplicación de motores aspiradores de aire, las turbinas de gas, se considerará aire como oxidante, siendo su contenido de oxígeno variante según el caso.

Durante la combustión, los enlaces químicos de los combustibles se rompen y se forman nuevos enlaces que crean los productos de la combustión. Estos dependen de qué combustible se emplee y en qué condiciones se realice la reacción, pero siempre que se use cualquier tipo de hidrocarburo, el  $CO_2$  y el agua son productos de la combustión, tal y como se aprecia en la reacción ajustada en la Ecuación 2.2.



Es muy común que, dadas las impurezas de tanto el combustible como el oxidante, se produzcan óxidos de nitrógeno ( $NOx$ ) y óxidos de azufre ( $SOx$ ), considerados contaminantes al no ser productos directos de la combustión como sí lo son el dióxido de carbono o el agua.

Como se ha mencionado en la Ecuación 2.1, la combustión produce energía, concretamente es una de las formas más sencillas de transformar la energía química contenida en combustibles en energía térmica y mecánica utilizables. Es por ello por lo que la combustión ha jugado desde un inicio un papel fundamental en la generación de energía a lo largo de la historia, aplicándose la generación de energía mediante este proceso en diferentes sectores, como el industrial, la generación de electricidad o el transporte, en el que se va a centrar el presente trabajo.

Por otro lado, la combustión se da al reaccionar un combustible y un oxidante, por lo que la reacción de combustión no se produce en todos y cada uno de los puntos del sistemas simultáneamente y de la misma forma, sino que existe una zona reactiva. Esta zona reactiva es donde se sitúa el frente de llama, y se produce donde hay reactivos, siendo extremadamente sensible a la temperatura.

Es por ello por lo que la estructura de la llama y su comportamiento será diferente según se produzca

el proceso de mezcla entre reactivos. Así, podemos clasificar dos tipos de llamas, premezcladas y por difusión, también conocidas como no premezcladas.

### 2.2.1. Llamas premezcladas

La combustión premezclada, tal y como indica su nombre, consiste en la mezcla del combustible y comburente antes de alcanzar la zona de reacción. Así, el porcentaje de oxidante y reductor que entran en la cámara de combustión y que van a reaccionar puede ser completamente controlado, dando lugar a un dosado controlado.

El tipo de proceso de combustión se puede caracterizar con un número adimensional conocido como el número de *Damköhler*,  $Da$ , empleado para comparar el tiempo de mezclado, tiempo físico, con el tiempo de reacción química. Este está definido de la siguiente manera [14]:

$$Da = \frac{t_{mix}}{t_{ch}} \quad (2.3)$$

Siendo  $t_{mix}$  el tiempo característico del mezclado de combustible y oxidante, y  $t_{ch}$  el tiempo característico de la reacción.

En el caso de la combustión premezclada, este valor es claramente 0 o tiende a 0, ya que el mezclado es muy rápido respecto a la velocidad de reacción. Si  $Da=1$  se da lo que se conoce como combustión parcialmente premezclada e implica que ambos procesos, físico y químico, son de importante consideración.

Por otro lado, este proceso de combustión premezclada se mantiene por medio de su propia liberación de calor, ya que en todo el dominio en el que la mezcla haya sido insertada habrá tanto oxidante como combustible. Además, el control de dosado (combustible/aire) permite establecer un valor de este relativamente bajo. Asimismo, al encontrarse homogéneamente mezclados, aparece un frente de llama cónico, y se establece una delgada capa que separa la mezcla fresca de los gases quemados. La existencia de un frente de llama que separa dos regiones de flujo con contenido energético y concentración de especies diferentes implica flujos de difusión de calor y masa desde los gases quemados hacia los no quemados. Esta difusión se puede conceptualizar como un avance del frente de llama superpuesto al campo de velocidad del flujo, lo que da lugar al concepto de velocidad de combustión laminar [15].

Como se puede apreciar en la Figura 2.3, las máximas temperaturas de llama se dan alrededor del dosado (inversa del ratio mostrado en la gráfica) estequiométrico, y estas máximas temperaturas de combustión provocan una mayor producción de ciertos contaminantes, como los NOx mostrados en la propia Figura 2.3. Por tanto, una gran ventaja que proporciona el uso de una combustión premezclada es la reducción de ciertos contaminantes trabajando a dosados distintos al estequiométrico.

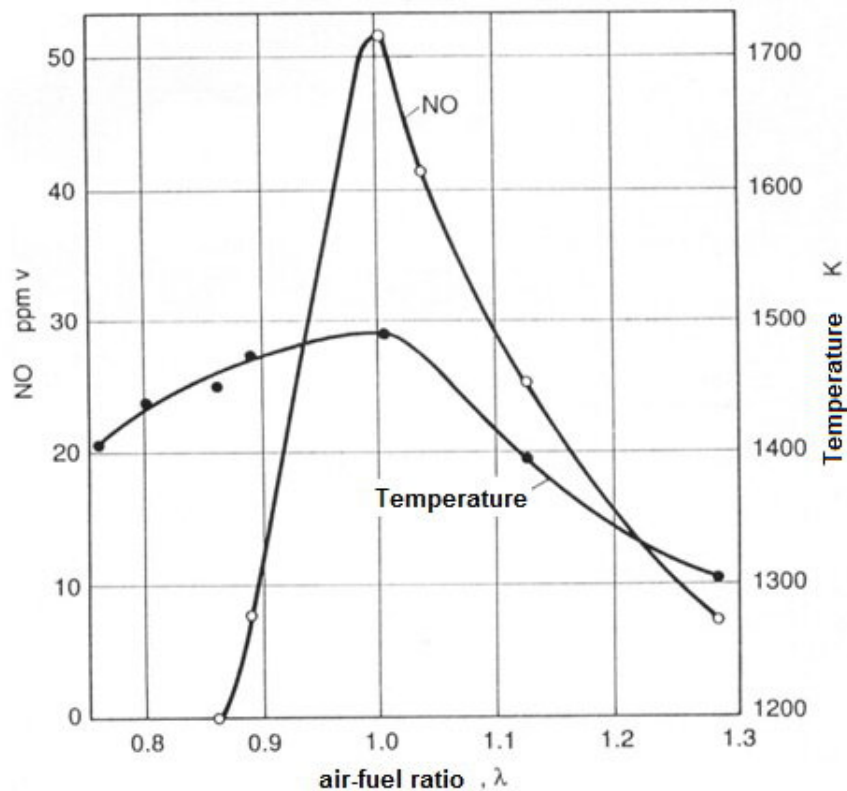


Figura 2.3: Temperatura y NO en función del ratio aire/combustible [16]

Este tipo de llamas son cada vez más comunes en las aplicaciones de turbina de gas, sin embargo no están plenamente incorporadas debido a las complejidades asociadas a su implementación.

El control de la combustión premezclada tiene asociados varios problemas a la estabilidad de la llama, como el *flashback* o el conocido como *blow-off*. [17]

En primer lugar, el *flashback* ocurre cuando la llama se propaga aguas arriba del combustor debido a que la velocidad del flujo es menor que la velocidad de combustión de la llama, lo que provoca el retroceso de la llama, pudiendo llegar hasta los tanques o conductos donde se aloje la mezcla. Este fenómeno supone un gran desafío en el diseño de sistemas que incorporen llamas premezcladas, ya que la velocidad de la llama depende en gran medida de la composición del combustible y comburente. Estudiar los límites del *flashback* es muy crítico ya que da una indicación sobre la seguridad de operación en cualquier sistema de combustión.

Por último, el *blow-off* es todo lo contrario al *flashback*, ocurre cuando la llama se separa del quemador, se propaga a una cierta distancia de este y, en consecuencia, se apaga físicamente. Esto ocurre cuando la velocidad del flujo de la mezcla es mayor que la velocidad de combustión de la llama. Es decir, este fenómeno ocurre cuando el tiempo requerido para que se produzca la reacción química es mayor que el tiempo de residencia de la combustión. Así, este se convierte en un problema ya que las tasas de las reacciones químicas y la velocidad de la llama de combustión varían no solo con la composición

química del combustible, sino también con las propiedades físicas del transporte del combustible. Ambos problemas limitan en gran medida el rango de uso de este tipo de combustión, ya que la principal limitación viene dada por la relación entre la velocidad del flujo de la mezcla y la velocidad de combustión de la llama. Al esta última depender plenamente de la composición de la mezcla y las condiciones de operación, estos quedan indirectamente limitados. Finalmente, nótese que la existencia de un frente de llama sostenido implica un equilibrio entre la producción química y el transporte por difusión. Sin embargo, si los flujos de difusión aumentan demasiado en intensidad, no pueden compensarse con la generación de productos químicos y la llama se extingue. Esto se ve claramente cerca de las paredes donde las pérdidas de calor apagan la llama.

### 2.2.2. Llamas de difusión

Por otro lado, en la conocida como combustión por difusión, o no premezclada, el combustible y oxidante entran en la zona de reacción en corrientes distintas. Así, la combustión no puede darse hasta que ambos reactivos no se han mezclado a nivel molecular.

Tal y como se puede deducir, la mezcla de ambos reactivos es más compleja que en el caso premezclado, por lo que es mucho más ineficiente. En este caso, el número de *Damhohler* de la Ecuación 2.3 es siempre mayor a 1, e implica que la reacción ocurre en una región muy pequeña entre el combustible y el oxidante, y la tasa de reacción está limitada por la tasa de difusión del combustible y oxidante.

Además, como ocurre en las llamas premezclada, la combustión se da en la zona de mayor temperatura, ya que la tasa de reacción, es decir, la velocidad a la que los reactivos se transforman en productos, es muy sensible a la temperatura. Esta viene descrita por la ecuación de Arrhenius  $k = A \cdot \exp(-E/RT)$ . Es por ello que, en la región de mayor temperatura ocurre una más rápida transformación de especies, resultando en gradientes locales de combustible y oxidante que acaban resultando en una fuerza para atraer la difusión de los reactivos a la zona de reacción.

Así, al no poder establecer un control directo sobre el dosado de las llamas de difusión, es mucho más complicado reducir sus emisiones de forma inmediata, sin sistemas auxiliares.

Las llamas premezcladas son características de los motores de encendido provocado, los actuales motores de gasolina, mientras que las llamas por difusión caracterizan a los motores de encendido por compresión o diésel y a las clásicas turbinas de gas. Como se ha comentado previamente, actualmente la tendencia del diseño de turbinas de gas es el uso de combustión parcialmente premezclada, ni puramente premezclada ni puramente de difusión, complicando todavía más su modelización. Teniendo en cuenta el alcance del presente trabajo, se centrará y analizará principalmente el segundo tipo de combustión ya que define de forma bastante acertada las llamas formadas en los quemadores aunque no del todo precisa.



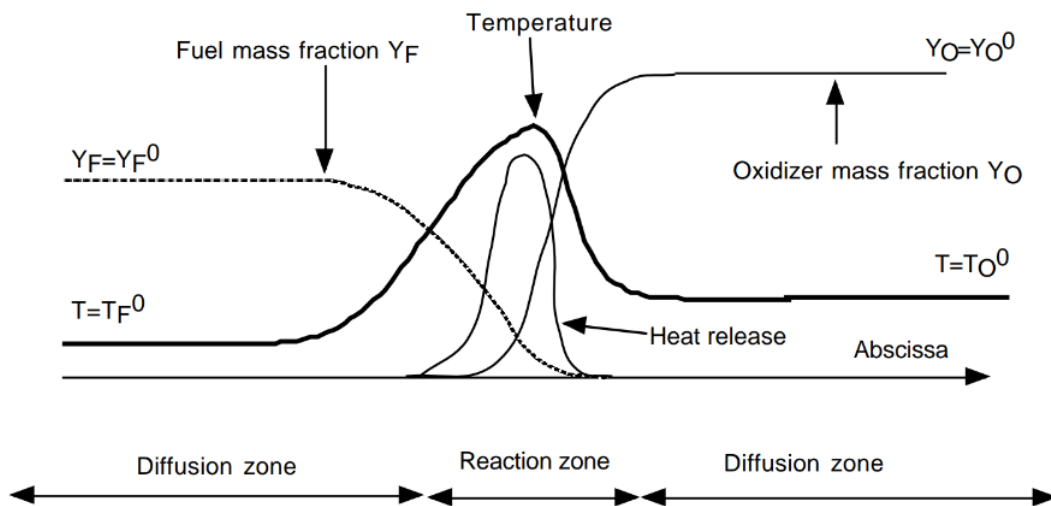


Figura 2.4: Estructura de una llama de difusión [18]

En la Figura 2.4 se ilustran varias consideraciones a tener en cuenta en el presente trabajo respecto a la formación de esta llama.

En primer lugar, a los lados de la llama, un tanto alejados, el gas es demasiado rico o demasiado pobre como para encenderse. Es por ello que las reacciones químicas solo pueden ocurrir en una región limitada física y químicamente que corresponde a una proporción estequiométrica combustible/oxidante.

Por otro lado, el presente trabajo se va a centrar en una de las llamas de difusión más simples y características, la conocida como *counter flow*.

Esta configuración se ve representada en la Figura 2.5, donde se pueden ver dos chorros contrapuestos de aire y combustible, la gran difusión que se produce, y la zona de reacción.

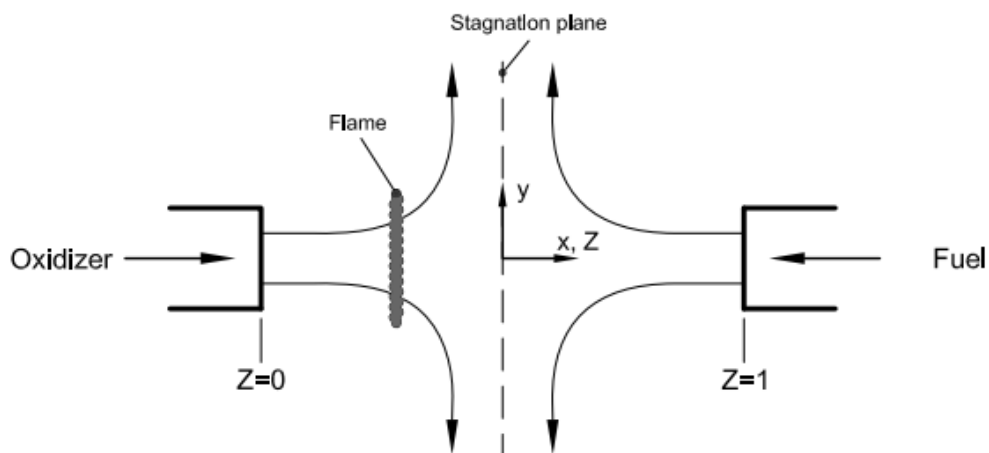


Figura 2.5: Llama de difusión laminar en configuración contrapuesta [19]

Esta configuración corresponde a una de las más importantes, donde las corrientes de combustible y oxidante fluyen en direcciones opuestas, y capas de mezcla reactiva y aerosoles donde se mueven en la misma dirección. Similar a la combustión premezclada, la llama se puede separar en una capa de difusión y una capa de reacción. Sin embargo, a diferencia de la llama premezclada, la llama de difusión no presenta una velocidad característica aunque puede ser formada con distinta intensidad. Cuanto más tensa esté la llama de difusión, menor será su grosor.

Otra característica interesante de las llamas de difusión en general es que, dada la falta de oxidante fuera de la zona de reacción, la combustión no puede propagarse por el combustible a ninguna velocidad, como sí ocurre en las llamas premezcladas.

Por último, cabe destacar una de las diferencias con las llamas premezcladas que van a marcar el desarrollo del presente trabajo. Las llamas de difusión no tienen un grosor de referencia, a diferencia de las premezcladas, que tienen un grosor definido según su velocidad de combustión laminar y las condiciones de la llama (combustible, comburente, condiciones ambiente...). En el caso de las llamas por difusión, dadas las mismas condiciones, se pueden obtener llamas completamente diferentes según el grado de estiramiento, o *Strain Rate*, como se llamará a lo largo del trabajo. Este parámetro, conocido como tasa de deformación, se define como la velocidad de deformación de la llama debido al flujo de reactivos y productos. Es una medida de la velocidad a la que la llama se estira por el campo de flujo. Su fórmula es la siguiente:

$$SR = \frac{1}{\tau_c} \cdot \frac{dV}{dx} \quad (2.4)$$

Donde SR es la tasa de deformación,  $\tau_c$  es la escala de tiempo característica de la reacción y  $dV/dx$  es el gradiente de velocidad a lo largo de la dirección de la llama.

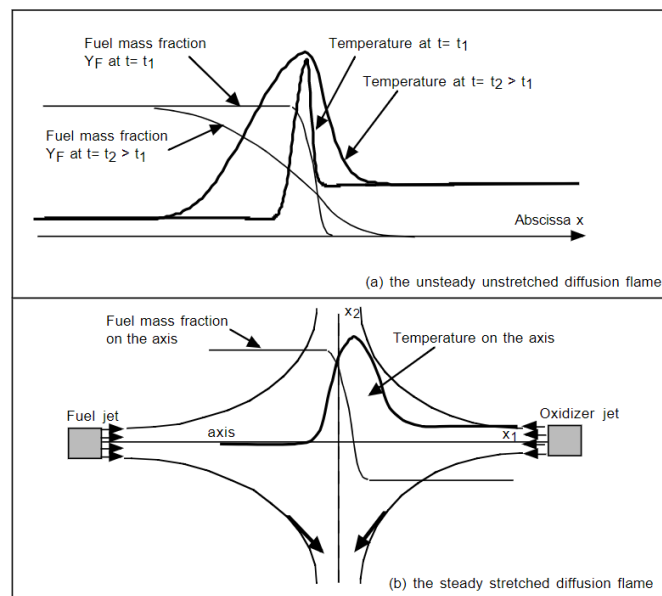


Figura 2.6: Dependencia de la llama de difusión con el estiramiento [18]

Tal y como se muestra en la Figura 2.6 se muestra una llama no estirada, o *unstretched*, que crece de forma indefinida conforme se aumenta el *Strain Rate*, tal y como se muestra en la Figura 2.6b hasta llegar a extinguirse por la imposibilidad de aportar combustible y oxidante al frente de llama en las proporciones adecuadas.

El *Strain Rate* puede tomar infinitos valores desde el 0 hasta el valor en el que se extinga la llama, que dependerá de las condiciones de esta (combustible, oxidante, temperatura del chorro, presión ambiente...). Esta variación del resultado según el *Strain Rate* impuesto a la llama será fundamental en el desarrollo del presente trabajo.

Además, cabe aclarar ciertos conceptos pertenecientes a las llamas de difusión que también serán cruciales para la completa comprensión de cómo se resuelve un flujo reactivo en los códigos de combustión, y en concreto en el modelo implementado y sus resultados.

### Fracción de mezcla

El estado de la mezcla, tal y como se puede deducir de lo previamente explicado, es fundamental en llamas de difusión. Este viene caracterizado por el parámetro  $z$  o *fracción de mezcla*, que relaciona la cantidad de oxidante con la de combustible.

La idea principal de este concepto es definir una cantidad conservativa, independiente de reacciones químicas que describa el estado de la mezcla. Se define como 0 en la corriente que contiene únicamente oxidante y como 1 en la corriente de combustible, y tomará todos los valores intermedios en los diferentes puntos de mezcla de ambos.

Existen diferentes formulaciones para este parámetro [20, 19], a pesar de que todas representan el mismo concepto físico. En el presente trabajo se emplearán dos definiciones de esta variable. En primer lugar, la definición de Bilger [21]:

$$Z = \frac{\beta - \beta_{ox}}{\beta_f - \beta_{ox}} \quad (2.5)$$

Dónde los subíndices  $f$  y  $ox$  denotan fuel y oxidante, y  $\beta = 2 \cdot \frac{Y_C}{W_C} + 0,5 \cdot \frac{Y_H}{W_H} - \frac{Y_O}{W_O}$ , donde  $Y$  representa la fracción másica del elemento (C,H u O) en cada punto, es decir,  $Y_j = \frac{m_j}{m_{total}}$ , y  $W$  representa el peso atómico de los elementos carbon, hidrógeno y oxígeno, constante en todo el dominio.

La otra representación de la variable fracción de mezcla que se empleará en el presente trabajo es mediante una ecuación de transporte propiamente para esta variable. Esta ecuación describe la evolución de la fracción de mezcla en el sistema de combustión del mismo modo que lo hace la definición de Bilger, considerando que  $Z$  es una variable conservativa. Implica la resolución de una ecuación extra, representada por la Ecuación 2.6, por parte el código.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot Z) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Z) = \nabla \cdot (\rho \cdot D \cdot \nabla Z) \quad (2.6)$$

Donde  $D$  es el ratio de difusión y  $\rho$  la densidad de la mezcla. Esta ecuación no incluye términos fuente ya que se considera que  $Z$  únicamente cambia debido a la convección y difusión. Esta describe el estado de la mezcla, y la isosuperficie  $Z(x, t) = Z_{st}$  puede ser interpretada como la traza de la llama localizada muy cerca de la mezcla estequiométrica, como se puede ver en la Figura 2.7

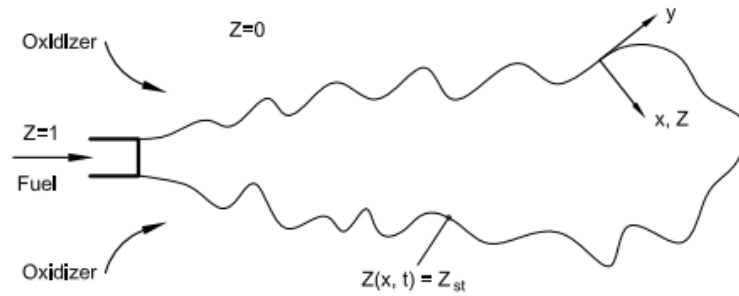


Figura 2.7: Isosuperficie de la fracción de mezcla estequiométrica en una llama de difusión [19]

Si se representa esto mismo en la configuración en la que se basa el presente trabajo, las llamas laminares de difusión contrapuestas, o *counterflow* se podría ubicar a la llama en la posición de  $Z_{est}$ , tal y como se aprecia en la Figura 2.5.

Esta variable, fracción de mezcla, es fundamental para describir las llamas por difusión, así como para modelizarlas. Principalmente, lo que se pretende es transformar la estructura reactiva-difusiva de la llama y su entorno al campo de fracción de mezcla. Este cambio permite obtener una solución analítica de las ecuaciones de transporte que describen la física y la química de la combustión reduciendo en gran cantidad el número de variables, ya que, por ejemplo, todas las especies son función de la fracción de mezcla y la temperatura:

$$Y_k = f_k(z, T)$$

Para todo  $k=1, N$ . Siendo  $N$  el número de especies que se estén teniendo en cuenta.

Esta única simplificación no es suficiente, se debe considerar también que la estructura de la llama depende la fracción de mezcla y el tiempo únicamente.  $T(z, t)$  y  $Y_k = Y_k(z, t)$ , estas dos funciones definirán la estructura de la llama.

Esta hipótesis es justificada e implica pasar de representar la combustión en un 4D  $(x_1, x_2, x_3, t)$  a  $(z, y_2, y_3, t)$  donde  $y_2, y_3$  son variables espaciales en planos paralelos a las isosuperficies de  $z$ . Al reescribir las ecuaciones resultantes al incluir estos cambios de variable, los términos correspondientes a los gradientes a lo largo del frente de llama ( $y_2$  e  $y_3$ ) se pueden despreciar en comparación con los gradientes perpendiculares a la llama (gradientes en  $z$ ) [20].

Físicamente, estas hipótesis implican que la estructura de la llama es localmente unidimensional y depende únicamente del tiempo y la coordenada normal al frente de llama (o  $z$ ).

En un flujo multidimensional (2D, 3D...), esta hipótesis requiere que la llama sea muy fina en com-

paración con otros flujos. Por ello, cada elemento del frente de llama puede ser visto como una pequeña llama laminar conocida como **flamelet**, que resulta la base de numerosos modelos de combustión.

Sin embargo, la estructura de flamelets que se obtiene con estas asunciones depende tanto del tiempo como de la fracción de mezcla, por tanto, puede ser empleado de dos formas diferentes. Por un lado para el cálculo de flamelets laminares no estacionarias, donde estas dependencias se conservan, o como flamelets laminares estacionarias, donde se asume que la estructura de la llama no varía con el tiempo y se obtiene un campo de temperatura y de especies que dependen de una única dimensión espacial o la fracción de mezcla, tal y como se asumirá en el presente trabajo.

### 2.2.3. Modelado de la combustión

Los modelos de combustión deben proporcionar una tasa de reacción promedio de las especies que representan el término fuente de su correspondiente ecuación de transporte. Como ya se ha señalado previamente, esta es una tarea desafiante y multidisciplinaria. Se han desarrollado una gran cantidad de modelos en las últimas décadas, lo que en parte se atribuye ciertamente a la complejidad del problema. Todos comparten objetivos comunes, todos ellos tratan de dividir y simplificar el problema, intentando disminuir el coste computacional para resolverlo, pero al mismo tiempo tratando de retener la química y la física detallada y necesaria del problema. La mayoría de los modelos solo cubren un determinado régimen de combustión y no son válidos en general, ya que es necesario hacer ciertas hipótesis para un tipo particular de combustión. Además, los modelos de combustión comúnmente se componen de dos componentes principales, donde uno es responsable del tratamiento de la química, mientras que el otro asegura el correcto acoplamiento de la química con el flujo turbulento. Existen diferentes enfoques para cada una de las dos subtarefas y son posibles diferentes combinaciones de esos enfoques.

#### 2.2.3.1. Modelos de combustión

Una primera opción, que no reduce en absoluto el coste computacional del cálculo de la combustión sería la resolución de todas las ecuaciones de transporte (momento, energía, todas las especies...) y toda la química de cada reacción de cada especie, con el fin de obtener los términos fuente de las propias ecuaciones de transporte, *on the fly*. Esto implica que se resuelvan celda a celda en el software de cálculo computacional en las diferentes iteraciones, con el modelo de turbulencia adecuado y el resto de regímenes que se deban tener en cuenta para el caso en concreto.

Tal y como cabe esperar, el coste computacional de este método es muy elevado, en muchos casos inadmisibles, así como el tiempo de cálculo, por lo que no es una opción considerada en el presente trabajo.

Otra opción resulta la tabulación adaptativa *in situ* - *ISAT* [19]. En esta aproximación, se crea una tabla química durante el proceso de cálculo de CFD. La información química se puede obtener de la tabla generada *on the fly*, es decir, durante el cálculo, teniendo en cuenta un error de interpolación estimado. Basándose en este control de errores, se toma una decisión sobre si se debe calcular o no un nuevo punto en el espacio. La gran ventaja de este método es que el tamaño de la base de datos está restringido al espacio realmente necesario. Esto contrasta con los métodos que utilizan pre-tabulación, los cuales se tratarán a continuación, donde inicialmente no se sabe a qué parte del espacio de composición se accede, y la química queda definida desde un inicio.

Por último, el modelo de combustión que será empleado en el presente trabajo es conocido como FGM, *Flamelet-Generated Manifolds*, desarrollado principalmente por *the Combustion Technology Group of Eindhoven University of Technology*. Esta es una conocida técnica que se ha empleado para modelar procesos de combustión, tanto en régimen laminar como turbulento tratando de reducir el coste computacional de estos cálculos sin renunciar a la fiabilidad de los resultados.

Este modelo asume que el espacio termoquímico accedido en una llama real está confinado a un subespacio de baja dimensionalidad, el cual se puede representar mediante llamas unidimensionales, las flamelets previamente presentadas. La idea de este modelo es que la llama turbulenta puede ser representado por un conjunto de flamelets laminares sumergidos en un flujo turbulento. En esencia, el método consiste en resolver un conjunto de flamelets y almacenar la información obtenida, todo el estado termoquímico, en una tabla (o *manifold*) de pocas dimensiones, en función de una serie de variables de control dictadas por el usuario y dependientes del código empleado para resolver el problema. Estos flamelets, al tener una estructura unidimensional pueden ser calculados con mecanismos químicos, que a continuación se aclararán, mucho más detallados.

Cuando se realiza la simulación del flujo con combustión de interés, se resuelve un conjunto de ecuaciones de transporte para las variables de control, y con los valores calculados en cada celda del dominio se recupera el estado termoquímico desde el *manifold*.

Es importante destacar que estas *flamelets* pueden ser estacionarias o no estacionarias según los requerimientos. Es por ello que este método ha sido muy atractivo los últimos años, dada su aplicabilidad a un amplio rango de regímenes de combustión (premezclada, parcialmente premezclada e incluso de difusión). Sin embargo, este modelo no es escalable a todas las aplicaciones, cuenta con un rango de validez. Este viene definido por la interacción entre la química y la turbulencia, y es que este modelo es únicamente válido para aquellos casos en los que el frente de llama no está afectado por esta, o lo está únicamente por las escalas pequeñas de turbulencia (los conocidos como *broken flamelets*). Para que esta hipótesis de los modelos tipo *flamelets* sea válida es necesario que la combustión sea lo suficientemente rápida en comparación a la turbulencia para que el frente no se vea afectado por ella. Esto, en llamas

de difusión ocurre para números de  $Da$  lo suficientemente grandes, donde el tiempo de combustión es pequeño, el frente de llama se estrecha y se puede caracterizar con llamas laminares 1D.

Conceptos como el supuesto de *flamelet*, la fracción de mezcla y la variable de progreso, que determina el avance de la combustión, junto con la pre-tabulación de los resultados obtenidos con el uso de química detallada, se aplican en el modelo de combustión implementado en este trabajo. En la siguiente sección se proporciona una descripción detallada de la estrategia de modelado implementada.

### 2.2.3.2. Modelado de la química

Para modelar la química de la combustión se han desarrollado en las últimas décadas los conocidos como mecanismos de cinética química.

Estos mecanismos describen las reacciones químicas que tienen lugar durante la combustión y se utilizan para modelar la formación y destrucción de especies químicas durante esta. Se emplean como una biblioteca que contiene información sobre las especies y reacciones químicas que se consideran en cada uno de ellos, así como todos los datos termodinámicos específicos, propiedades de transporte... Así, cuantas más reacciones y especies se consideren, mayor rango de uso y mayor precisión tendrá el mecanismo cinético en el cálculo.

Es importante destacar que estos modelos pueden ser simplificados estratégicamente para reducir la complejidad computacional, tratando de comprometer al mínimo la precisión de los resultados, por lo que lo más lógico es hacer uso de ellos para un sistema físico-químico en particular, en un rango de condiciones más restrictivas que el modelo extendido. Es por ello que se suelen emplear generalmente en estudios con configuraciones concretas.

Los mecanismos cinéticos suelen estar clasificados en detallados, simplificados o *skeletal* y reducidos, según el número de especies químicas y reacciones que caracterizan a cada mecanismo [22].

En la actualidad se pueden encontrar un gran número de mecanismos cinéticos químicos para modelar flujos reactivos, es decir, la combustión. Muchos de ellos son después empleados para modelar la formación de hollín, pero no todos son válidos. Esto se debe a que en el mecanismo cinético, debe estar incluida la especie que se necesite en el hollín, como pueden ser los aromáticos (A1, A2, A3, A4...). Si el mecanismo cinético considerado no incluye los compuestos que requiera el modelo de hollín, no podrá predecirse su formación durante la combustión.

En la Tabla 2.1 se describen algunos mecanismos cinéticos químicos que podrían o han sido empleados para calcular llamas y aplicar un modelo de predicción de hollín.

Mecanismo cinético	Nº especies	Nº reacciones	Configuraciones empleadas para la validación	Referencias
DLR	112	939	Llamas premezcladas laminares, llamas difusivas de contraflujo	[23]
KM2	202	1351	Llamas premezcladas laminares, llamas difusivas de contraflujo	[24]
C1GEVO	443	2433	Llamas difusivas	

Tabla 2.1: Mecanismos cinéticos químicos usados para el modelado de la formación de hollín en llamas laminares

Como se puede apreciar, existe una relación matemática entre el número de especies consideradas y el número de reacciones de cada mecanismo.

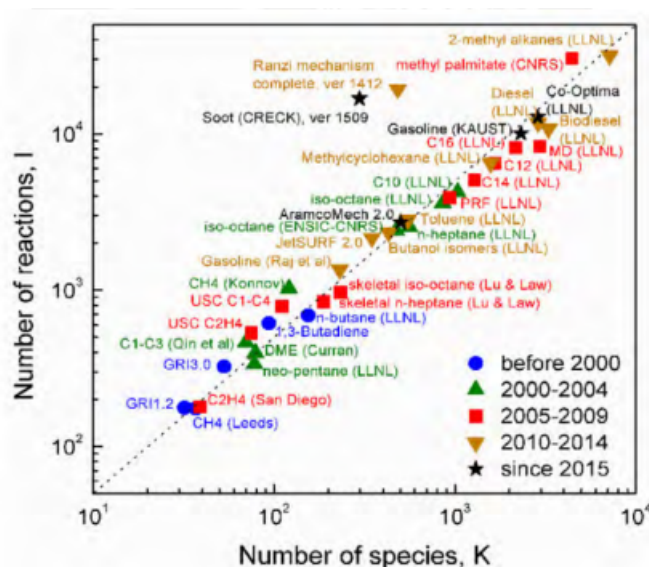


Figura 2.8: Número de especies y reacciones químicas incluido en diferentes mecanismos cinéticos [10]

La Figura 2.8 muestra el tamaño de los mecanismos cinéticos detallados en función del número de reacciones y número de especies presentes en estos mecanismos. Esta figura indica que el número de especies y reacciones presentes en un mecanismo cinético crece de forma logarítmica, a medida que aumenta la complejidad del combustible o se requiere describir más especies químicas.[25]



## 2.3. Fenomenología y modelado de hollín

### 2.3.1. Formación de hollín

El hollín es un producto generado a partir de la combustión incompleta de combustibles de hidrocarburos. Se trata de partículas de carbono amorfo, con una forma similar a la del polvo, de tamaño muy pequeño, de 25 a 700 nanómetros. Su formación ocurre tanto en llamas por difusión como en llamas premezcladas.

Tal y como se ha mencionado previamente, la nocividad de este contaminante es muy alta, pero hasta hace escasos 5 años, su formación, y en consecuencia su predicción, era totalmente desconocida más allá del hecho que tras su formación se aglutinaban en partículas de mayor tamaño.[26]

En los últimos años se ha conseguido llegar a un consenso respecto a como ocurre su formación, ya que todos los esfuerzos por reducir las emisiones de hollín, conocido también como *soot*, dependen de una comprensión básica de los caminos físicos y químicos que toma el combustible hasta convertirse en partículas de hollín en las llamas.

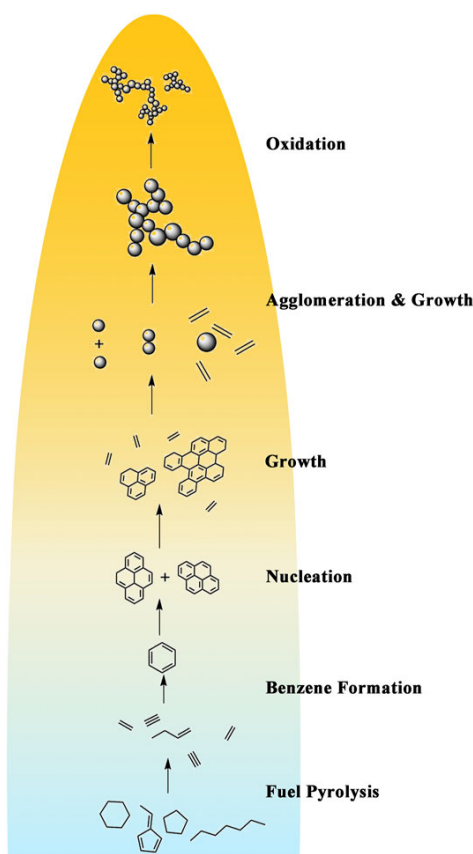


Figura 2.9: Procesos físicos y químicos para la formación del hollín [4]

En la Figura 2.9 se muestra de forma clara los procesos que ocurren, de forma ordenada, para llegar a formarse hollín y que serán descritos a continuación. Cabe destacar que las reacciones químicas

involucradas en la formación de *soot* en llamas de difusión dependen de algunos factores como el tipo de combustible, temperatura y presión. Sin embargo, el conjunto descrito en la Figura 2.9 es común para todas las condiciones.

De forma general, la formación de hollín está comprendida por procesos relacionados primero a una fase gaseosa y luego a una sólida. La primera fase está gobernada por reacciones químicas que conllevan a la formación y crecimiento de moléculas aromáticas, mientras que la segunda está vinculada a interacciones tanto químicas como físicas entre partículas.

En primer lugar, se tiene que dar la **pirólisis** del combustible bajo condiciones de dosado rico, es decir, más combustible que el definido por la relación estequiométrica. Este exceso producirá que no se produzca una combustión completa del hidrocarburo, siendo este el causante de la aparición del hollín.

Además, este exceso de combustible dará lugar a la formación de los compuestos conocidos como **precursores de hollín**, como puede ser el acetileno, el benceno y los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH en inglés), siendo el acetileno el hidrocarburo predominante en atmósferas reductoras [27]. Estos precursores son los compuestos que eventualmente se convertirán en partículas de hollín.

Este proceso de pirólisis y formación de precursores está normalmente descrito por un mecanismo químico de fase gas que proporciona las especies suficientes para iniciar el proceso de formación de hollín.

Tras la formación de los precursores da inicio la formación del hollín propiamente dicha, comenzando con la **nucleación** de esas moléculas pesadas de benceno u otros precursores para formar partículas sólidas. Esta es una etapa fundamental en la formación de hollín, y se produce cuando los precursores de hollín se agrupan para formar estructuras tridimensionales. Es también la etapa más desconocida y en el que más incertidumbre hay, ya que todavía no se ha alcanzado un consenso sobre el mecanismo físico predominante.

Actualmente existen tres clasificaciones: nucleación química, física y físico-química. Tal y como se explicará más adelante, en el modelado numérico el mecanismo más empleado es la nucleación por apilamiento (colisión y coalescencia del pireno).

El siguiente paso fundamental en la constitución del *soot* es el **crecimiento de partículas**. Esta etapa está relacionada con el aumento de las partículas tanto en masa como en tamaño al interactuar entre ellas.

Es posible resumir los mecanismos de crecimiento de partículas como (i) crecimiento superficial de las partículas, (ii) coalescencia de las partículas y (iii) aglomeración de partículas.[22]

El primer mecanismo implica adiciones de masa a través de reacciones que tienen lugar en la superficie de la partícula. Uno de los mecanismos predominantes aquí es el HACA, la adición de acetileno por abstracción de hidrógeno, a través del cual el lado reactivo en el borde de la partícula es activado

por deshidrogenación, y posteriormente una molécula de acetileno es agregada al espacio libre.

Por otro lado, la coalescencia describe a su vez la colisión física de partículas y su fusión. Como resultado, una estructura esférica es formada y la superficie total de la partícula disminuye, tal y como se aprecia en la Figura 2.10(a).

Finalmente, la aglomeración de partículas de hollín implica la adherencia de partículas en un punto de contacto, originando como resultado la formación de estructuras fractales, como representa la Figura 2.10(b).

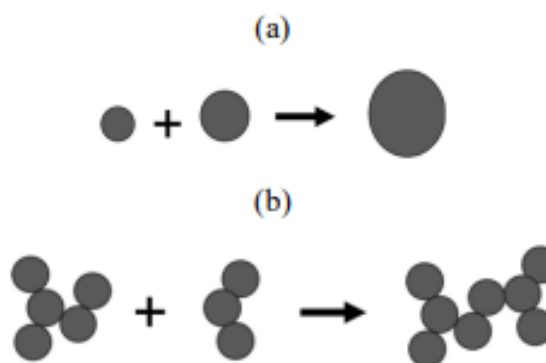


Figura 2.10: Mecanismos de crecimiento de hollín [22]

A medida que las partículas de hollín son fusionadas y la superficie disminuye, los procesos de coalescencia resultan más predominantes que los de crecimiento superficial.

El último proceso físico-químico que tiene que tener lugar para que se produzca hollín es la **oxidación** de los diferentes componentes. Se trata de un paso fundamental de controlar para reducir sus emisiones. Esta oxidación es definida como los procesos de reacción química que ocurren en la superficie de las partículas de hollín debido al ataque de una molécula de oxígeno o un radical OH, lo que resulta en una reducción de la masa y volumen de hollín.

### 2.3.2. Modelado del hollín

Como se ha comentado previamente, el mayor avance en el desarrollo de los modelos de hollín se ha dado en las últimas décadas, donde se han desarrollado desde diferentes perspectivas.

La predicción de la emisión de hollín es extremadamente difícil debido a su naturaleza compleja, caracterizada por un fuerte acoplamiento entre los parámetros de flujo, características de la llama y el propio hollín. Para poder modelar el hollín correctamente es necesario considerar un alto número de precursores de este, por lo que el uso de mecanismos cinéticos detallados es fundamental. Debido a esto, el coste computacional del cálculo de la producción de hollín es muy costoso, incluso inviable en algunas aplicaciones.

Por ello, para reducir este tiempo computacional se han propuesto diferentes técnicas que siguen en constante desarrollo y mejora.

Como en la mayoría de aplicaciones, se han desarrollado *modelos empíricos* o *semi-empíricos* que tratan de aproximar la predicción de hollín. Tal y como ocurre con este tipo de modelos, son bastante simples, pero están muy limitados a las condiciones de operación de los experimentos de los que se han extraído los resultados. Es por ello que el presente trabajo se va a basar en modelos computacionales no experimentales, tratando de aumentar el rango de cálculo y predicción de estos al mayor número de condiciones posibles, lo cual resulta el mayor reto en la actualidad.

En primer lugar, uno de los modelos no experimentales más sencillos, pero también preciso, resulta ser el *modelo de dos ecuaciones*. Tal y como su nombre indica, este modelo se basa en la resolución de dos ecuaciones de transporte para dos parámetros de hollín, *number density*,  $N_s$ , que se trata del número de partículas de hollín por unidad de masa de mezcla, y la fracción másica de hollín,  $Y_s$ , que es la masa de hollín por unidad de masa de mezcla.

Concretamente, la Ecuación 2.7 representa la fracción másica de hollín:

$$\rho \frac{\partial Y_s}{\partial t} + \rho U \frac{\partial Y_s}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\rho V_s Y_s] + \dot{\omega}_{Y_s} \quad (2.7)$$

Y la Ecuación 2.8 representa el *number density* del hollín:

$$\rho \frac{\partial N_s}{\partial t} + \rho U \frac{\partial N_s}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\rho V_s N_s] + \dot{\omega}_{N_s} \quad (2.8)$$

En ambas ecuaciones  $\rho$  es la densidad total,  $\rho = \frac{m_{TOT}}{V_{tot}} = (1 - f_v)\rho_g + f_v\rho_s$ .  $V_s$  es la velocidad termoforética,  $V_s = -0,55 \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial x}$ . Sin embargo, los términos fuente,  $\dot{\omega}_{Y_s}$  y  $\dot{\omega}_{N_s}$ , dependen del software empleado, pero representarán los procesos de formación de hollín previamente descritos, teniendo en cuenta su contribución combinada. Cabe destacar que la fracción másica estará controlada por los procesos de nucleación, crecimiento superficial y oxidación, mientras que el número de partículas únicamente por la nucleación y aglomeración producida [28]. Estos serán explicados en detalle para el software empleado en el presente trabajo.

Este modelo tiene la ventaja de ser computacionalmente muy eficiente y proveer predicciones precisas de masa de hollín. Además, puede ser empleado junto con otros modelos, como el de flamelets, tal y como se va a realizar en el presente trabajo. Sin embargo, este modelo puede no capturar bien todos los rangos de tamaños de partículas, ya que estos son calculados como parte del postproceso y puede no ser el más adecuado para predecir la estructura detallada de la distribución de tamaño de partícula.

Si se quiere añadir un grado más de precisión, y en consecuencia de coste computacional, existen

también *modelos de 3 ecuaciones*, en los que se calcula también el diámetro de partícula, dando una información muy valiosa de cara a la caracterización del hollín en relación con la normativa actualmente implementada, en la que uno de los parámetros a medir para caracterizar la peligrosidad del contaminantes es el tamaño de la partícula en concreto.

Por último, cabe destacar la existencia de *modelos de predicción de hollín detallados*, como el modelo seccional o el método de los momentos. Ambos dan una estimación de la cantidad y fracción másica de hollín, pero también proporcionan información de la distribución de tamaño de partícula de hollín. En concreto, el modelo seccional de hollín ha sido empleado y validado en el CMT-Motores térmicos. En este modelo la distribución de las partículas de hollín es discretizada en  $N_{sec}$  secciones. Cada sección  $i$  representa a las partículas de *soot* que tienen un volumen entre  $v_i^{min}$  y  $v_i^{max}$ . Para esta sección, y cada una de ellas, la fracción másica de hollín,  $Y_{s,i}$ , es calculada con la siguiente ecuación de transporte [29]:

$$\frac{\partial \rho Y_{s,i}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(u + v_T)Y_{s,i}) = \rho_s \dot{Q}_{s,i} \quad (2.9)$$

Donde  $\rho$  es la densidad de la fase gas,  $u$  es la velocidad del gas y  $v_T = -0,554 \cdot \frac{v}{T} \nabla T$  la conocida como velocidad termoforética. Por último  $\rho_s$  es la densidad constante del soot, valor que varía entre los 1800 y 2000  $kg/m^3$  según la referencia tomada, y  $\dot{Q}_{s,i} = \rho \dot{q}_{s,i}$  es la tasa de producción en  $s^{-1}$  de la fracción volumétrica de hollín en la sección dada,  $i$ . La tasa de producción  $\dot{q}_{s,i}$  en  $m^3 kg^{-1} s^{-1}$  tiene en cuenta todos los procesos descritos en el subapartado anterior, por lo que consistirá en la suma de la tasa de nucleación, aglomeración, crecimiento y la resta de la oxidación, ya que esta reduce el número de partículas de hollín.

Una de las principales ventajas de este modelo es que proporciona una representación directa de la distribución del tamaño de las partículas de hollín. Este dato es completamente necesario para aplicar las predicciones conseguidas con el modelo al diseño de sistemas de combustión reales ya que las medidas reglamentarias respecto a la producción de hollín y otras partículas contaminantes se dan normalmente según el tamaño de estas.

Adicionalmente, se ha demostrado que se trata de un modelo notablemente preciso, con una alta resolución. Sin embargo, la velocidad de cálculo de este modelo está limitada, y depende de cómo se discretice el tamaño de partícula de hollín, por lo que para conseguir buena resolución el coste computacional será elevado [30].

Como en todo problema de ingeniería, se debe alcanzar un compromiso entre el coste computacional del modelo y la información que este te va a proporcionar. Es por ello que el presente trabajo se va a basar en uno de los modelos de hollín que más reducen el coste computacional, el modelo de dos ecuaciones.



## Capítulo 3

# Herramientas y metodología

En esta sección se presentarán las herramientas de software y la metodología empleadas en el desarrollo y validación del modelo de predicción de hollín en quemadores de turbinas de gas. Las herramientas utilizadas han sido:

- LFLAM
- Alya
- MATLAB
- ParaView

En primer lugar, se ha seleccionado LFLAM como la herramienta de simulación computacional para llamas unidimensionales. Se ha empleado Alya como software de dinámica de fluidos computacional, con el fin de implementar el modelo tabulado fruto de los cálculos de LFLAM; y MATLAB ha sido fundamental para el análisis de datos y la optimización del flujo de trabajo. Por último, ha sido necesario el uso de ParaView para visualizar los contornos de las diferentes variables calculadas con Alya.

Además, se siguió una metodología sistemática para abordar cada etapa del desarrollo del modelo y la validación del mismo. Esta metodología incluyó la recopilación de datos de referencia, la configuración de los casos de estudio, la ejecución de simulaciones, el análisis de resultados y la comparación con datos experimentales. A través de este enfoque metodológico, se buscó garantizar la coherencia, la precisión y la robustez del modelo propuesto.

El planteamiento de modelado que se sigue en este trabajo asume que las llamas reales turbulentas, que se resuelven mediante códigos de dinámica de fluidos computacional (Alya) se comportan como conjuntos de llamas unidimensionales de flujos opuestos, que aquí se resuelven con LFLAM. Bajo esa hipótesis, todo el problema de las reacciones de combustión y formación de hollín, se resuelven en 1D,

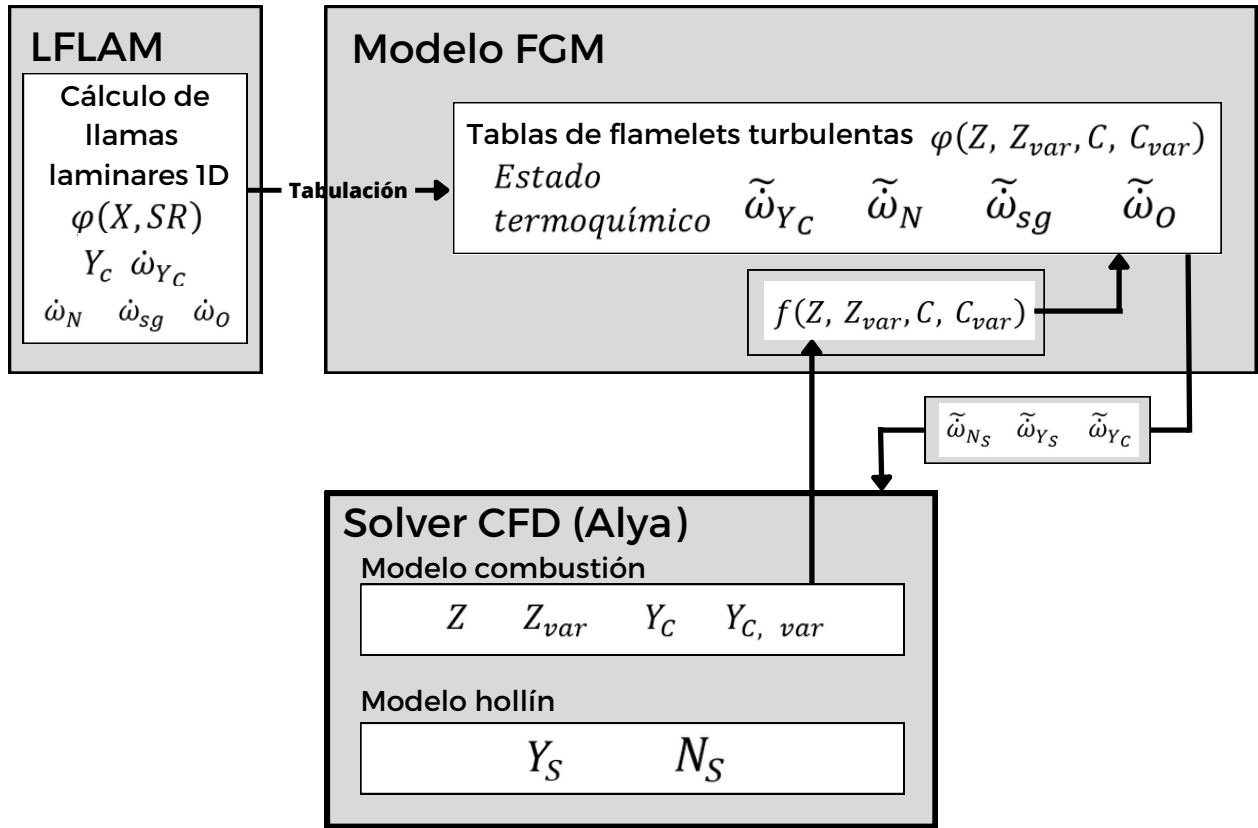
y esta información se tabula para ser utilizada por el código CFD. De esta forma, se evita que el CFD tenga que resolver el problema 3D reactivo y con formación de hollín, más costoso computacionalmente que hacer uso de una tabulación hecha previamente al cálculo.

### 3.1. Planteamiento de modelado

Se presenta en la Figura 3.1 el flujo de trabajo que se va a seguir en todo el proyecto. Tal y como se anticipó previamente, el modelo de combustión empleado en este trabajo es el FGM o *Flamelet Generated Manifold*. Este basa en resolver casos de CFD haciendo uso de unas tablas pregeneradas de las cuales se extraerá la información del estado termoquímico del fluido así como ciertos términos fuente necesarios para resolver ecuaciones de transporte que sí que son resueltas por el *solver* de CFD. Así, tal y como se explica en la Figura 3.1 en primer lugar se calcularán las llamas de *counterflow* unidimensionales con LFLAM, cuyo procedimiento detallado se explicará a continuación, en función del *Strain Rate* y la posición espacial. Tras ello, se parametrizará el estado termoquímico en función de dos variables de control,  $Z$  y  $C$ , tal y como se ha explicado previamente gracias al cálculo de la variable de progreso, que más adelante se detallará,  $Y_C$  y  $Z_{bilger}$ , y se generarán las tablas en función de estos valores y sus varianzas. La adición de las varianzas como variable independiente es necesaria para pasar de *flamelets* laminares, que es lo que se calcula con LFLAM, a una parametrización turbulenta, que es lo que requerirá el CFD si se trata del cálculo de un caso turbulento. Si se quiere calcular únicamente un caso laminar en CFD, las dos variables relacionadas con la varianza pueden ser suprimidas o igualadas a 0.

El CFD por su parte transportará las ecuaciones de la variable de progreso y fracción de mezcla, y con los valores obtenidos para cada celda del espacio, accederá a las tablas y obtendrá toda la información indicada en la Figura 3.1. Con esta información, y agrupando todos los términos fuente en los términos fuente de  $N_S$  e  $Y_S$ , podrá calcular las dos ecuaciones correspondientes al hollín para así finalmente obtener un resultado de estos parámetros en todo el dominio de una forma precisa y eficiente.



Figura 3.1: *Workflow* del proyecto

## 3.2. Herramientas

A continuación, se detallarán las principales herramientas utilizadas en este trabajo, incluyendo la descripción de los software específicos y sus funcionalidades relevantes. Asimismo, se presentará la metodología seguida, destacando los pasos clave y las consideraciones importantes en cada etapa del proceso.

### 3.2.1. LFLAM

LFLAM es un software empleado en el campo de la combustión y la química. Se trata de una herramienta de simulación computacional que permite modelar y analizar procesos químicos en una dimensión, considerando fenómenos de transporte, cinética química y equilibrio químico.

Su nombre *LFLAM* proviene de "*Laminar Flamelets*", lo que indica que se centra en la modelización de este tipo característico de llamas, previamente explicadas. Estas son fenómenos químicos en

sistemas unidimensionales, aplicables principalmente a *counterflow flames*.

Este software y su modelo de combustión ha sido desarrollado por el *Modelling and Numerical Simulation Group* del CIEMAT, el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, mientras que la implementación del modelo de hollín de 2 ecuaciones fue llevada a cabo en colaboración con el CMT- Motores térmicos de la Universidad Politécnica de Valencia.

LFLAM cuenta con dos versiones, XLFLAM, que resuelve las ecuaciones de conservación de la masa, la cantidad de movimiento, las especies... en el espacio físico unidimensional, esto es, en función de una única coordenada espacial, y ZLFLAM, una versión alternativa del código que resuelve las conocidas como ecuaciones del *flamelet*, en el espacio fracción de mezcla.

Además, cabe destacar que este software es únicamente un código, por lo que se preprocesa, analiza y posprocesa a raíz de los archivos que genera y los que emplea como *inputs*, por lo que no cuenta con una interfaz *user-friendly*. Es por ello que en el presente trabajo se intentará hacer de la herramienta LFLAM algo más asequible y constatar la validez de sus resultados.

Se presentarán a continuación las ecuaciones que resuelve XLFLAM, siempre en el espacio físico (dimensión  $x$ ), pero antes de ello, cabe aclarar ciertos conceptos empleados las expresiones:

En primer lugar, los subíndices  $s$  hacen referencia al *soot* (fase sólida), mientras que los subíndices  $g$  hacen referencia a la fase gaseosa. El total será la suma de ambas aportaciones, tanto para la masa como para el volumen.

Por otro lado, la fase gas consta de una mezcla multicomponente, formada por varias especies. El subíndice  $k$  se utilizará para referirse a una especie genérica de la mezcla.

Así, la fracción volumétrica de hollín, o *SVF*, tal y como se llamará en el presente trabajo, se calcula de la siguiente manera:

$$SVF = \frac{v_s}{v_{tot}} \quad (3.1)$$

Por otro lado, las fracciones másicas de las especies están implementadas considerando únicamente la fase gas, mientras que la del hollín considerando la masa total, como cabe esperar:

$$Y_k = \frac{m_k}{m_g} \quad Y_s = \frac{m_s}{m_{tot}} \quad (3.2)$$

$$\text{Con } \sum_k Y_k = 1.$$

Por último, las densidades de las fases consideradas y la total, pueden ser calculadas de la siguiente forma:

$$\rho_g = \frac{m_g}{v_g}, \quad \rho_s = \frac{m_s}{v_s} \quad y \quad \rho = \frac{m_{tot}}{v_{tot}} = (1 - SVF)\rho_g + SVF\rho_s \quad (3.3)$$

Teniendo en cuenta estas definiciones, otra forma de calcular la fracción volumétrica de hollín o SVF, la cual será ampliamente empleada en este trabajo dada su presencia en los datos experimentales, es la siguiente:

$$SVF = \frac{\rho}{\rho_s} \cdot Y_s \quad (3.4)$$

Una vez aclarada la nomenclatura, cabe destacar que las ecuaciones en LFLAM están implementadas considerando la densidad total, es decir, teniendo en cuenta la masa del hollín, la cual en muchos casos se considera despreciable. Así, se obtendrá un resultado más preciso que obliga a añadir un término extra a todas las ecuaciones de transporte que gobiernan la física del proceso.

En primer lugar, la ecuación implementada en LFLAM que representa la fracción másica de hollín:

$$\rho \frac{\partial Y_s}{\partial t} + \rho U \frac{\partial Y_s}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\rho V_s Y_s] + \dot{\omega}_{Y_s} + Y_s \frac{\partial}{\partial x} [\rho V_s Y_s] \quad (3.5)$$

Y la ecuación que representa el *number density* del hollín:

$$\rho \frac{\partial N_s}{\partial t} + \rho U \frac{\partial N_s}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\rho V_s N_s] + \dot{\omega}_{N_s} + N_s \frac{\partial}{\partial x} [\rho V_s N_s] \quad (3.6)$$

Por otro lado, las ecuaciones de transporte implementadas en XLFLAM que gobiernan la física del flujo reactivo son las siguientes:

En primer lugar, la ecuación de conservación de la masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho \cdot \vec{v}}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\rho \cdot V_s \cdot SVF] \quad (3.7)$$

En segundo lugar, la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \cdot \vec{v} \cdot \vec{v}}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\vec{\tau} - p] + \rho \cdot \vec{g} - \frac{\partial}{\partial t} [\rho \cdot \vec{v}] \cdot \dot{\omega}_s \cdot M_s \quad (3.8)$$

Por otro lado, la ecuación de conservación de la energía expresada en función de la entalpía,  $h$ :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho \cdot \vec{v} \cdot h}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [\vec{q}] - \frac{\partial}{\partial t} [\rho \cdot h] \cdot \dot{\omega}_s \cdot M_s \quad (3.9)$$

Y por último, la ecuación de transporte de las distintas especies:

$$\frac{\partial (1 - SVF)\rho_g \cdot Y_k}{\partial t} + \frac{\partial (1 - SVF) \cdot \rho_g \cdot Y_k \cdot U}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} [(1 - SVF) \rho_g \cdot V_k \cdot Y_k] + \dot{\omega}_k - \dot{\omega}_k^s \quad (3.10)$$

En la Ecuación 3.10,  $\dot{\omega}_k^s$  es el término fuente de las especies  $k$  debido a las reacciones con hollín.

De igual manera, la otra versión existente de LFLAM, ZLFLAM, resuelve estas mismas ecuaciones en el espacio fracción de mezcla,  $Z$ , dando lugar a las mencionadas ecuaciones del *flamelet*.

Por otro lado, LFLAM cuenta con un modelo de hollín implementado, el previamente explicado modelo de 2 ecuaciones en el que se resuelven las ecuaciones de transporte de  $N_s$  e  $Y_s$ , concretamente las ecuaciones 2.7 y 2.8.

Las reacciones consideradas, representando las partículas sólidas de hollín como  $C_S$ , y teniendo en cuenta que existen dos posibilidades para considerar la nucleación de hollín, son las siguientes:

Reacción		Tasa de reacción
Nucleación	$C_2H_2 \rightarrow 2C_S + H_2$	$\dot{\omega}_{nuc1}$
	$C_{16}H_{10}(A4) \rightarrow 16C_S + H_2$	$\dot{\omega}_{nuc2}$
Crecimiento superf.	$C_2H_2 + nC_S \rightarrow (n+2)C_S + H_2$	$\dot{\omega}_{sg}$
Oxidación por $O_2$	$C_S + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	$\dot{\omega}_{oxO_2}$
Oxidación por $OH$	$C_S + OH \rightarrow CO + H$	$\dot{\omega}_{oxOH}$
Oxidación por $O$	$C_S + O \rightarrow CO$	$\dot{\omega}_{oxO}$

Tabla 3.1: Reacciones consideradas para el hollín

En el caso de este software, el término fuente de la fracción másica de hollín está compuesto por los términos fuentes de la nucleación, crecimiento superficial y oxidación, todos ellos en  $kg/m^3s$ , considerando el número de carbonos que se generan en las reacciones ajustadas y las dos posibles nucleaciones, de la siguiente forma:

$$\dot{\omega}_{Y_s} = 2 \cdot \dot{\omega}_{nuc1} + 2 \cdot \dot{\omega}_{sg} - \dot{\omega}_{ox} \quad (3.11)$$

$$\dot{\omega}_{Y_s} = 16 \cdot \dot{\omega}_{nuc2} + 2 \cdot \dot{\omega}_{sg} - \dot{\omega}_{ox} \quad (3.12)$$

Estando el término fuente de la oxidación compuesto de la siguiente forma:

$$\dot{\omega}_{ox} = \dot{\omega}_{oxO_2} + \dot{\omega}_{oxOH} + \dot{\omega}_{oxO} \quad (3.13)$$

Por otro lado, el término fuente del *soot number density* no es tan directo de calcular y sigue la siguiente ecuación:

$$\dot{\omega}_{N_s} = \dot{\omega}_{nucl} \cdot \frac{2N_A}{NC_{min}M_s} + \dot{\omega}_{agg} \quad (3.14)$$

En esta ecuación,  $\dot{\omega}_{agg} = 2C_\alpha \left(\frac{6M_s}{\pi\rho_s}\right)^{1/6} \left(\frac{6kT}{\rho_s}\right)^{1/2} \left(\frac{\rho Y_s}{M_s}\right)^{1/6} (\rho N_s)^{11/6}$ ,  $N_A$  es la constante de Avogadro igual a  $6,02214076 \cdot 10^{23}$  part/mol,  $M_s$  es el peso molecular del hollín, igual a 12 kg/kmol.

Los valores de las constantes no universales no son únicos, ya que LFLAM tiene incorporado 5 submodelos de hollín extraídos de la bibliografía. Estos se diferencian en la consideración que le dan a cada subproceso de la formación de hollín para el cálculo de los términos fuente de las ecuaciones de transporte.

- El **submodelo 1**, también llamado LLJ [31], hace referencia al modelo desarrollado por K.M. Leung y R.P. Lindstedt. Estos investigadores presentaron un mecanismo de reacción simplificado para la nucleación, crecimiento, aglomeración y combustión de las partículas de hollín en llamas de difusión. Este modelo ha sido ampliamente validado experimentalmente en *counterflow flames* de propano y etileno. En este submodelo se considera la nucleación 1, por acetileno, y no se considera oxidación ni por  $OH$  ni por  $O$ .
- El **submodelo 2**, también llamado FJL [32], desarrollado por M. Fairweather, W. P. Jones y R. P. Lindstedt, se trata de un modelo de formación de *soot* comparado con datos experimentales de laboratorio y estudios de llamas de gas natural. Del mismo modo, este submodelo considera la nucleación 1, por acetileno, y no considera oxidación ni por  $OH$  ni por  $O$ .
- El **submodelo 3**, también llamado LGSG [33], ha sido desarrollado por Fengshan Liu, Hongsheng Guo, Gregory J. Smallwood y Ömer L. Gülder. Este modelo ha sido ampliamente probado en llamas de difusión contrapuestas de etileno y aire a presión atmosférica. En este submodelo se sigue considerando la nucleación por acetileno, pero sí que se considera la oxidación del hollín por  $OH$  y por  $O$ .
- El **submodelo 4** resulta una variación del submodelo 3, propuesta por Zimmer [8], en el que se considera un diferente crecimiento superficial y oxidación del hollín, así como una diferente densidad de este.
- Por último, el **submodelo 5** es algo diferente de los demás, ya que es el único que considera la nucleación por  $A_4$ , el pireno descrito en la Tabla 3.1, lo que en el marco actual se está considerando lo más correcto y avanzado.

Todos estos calculan las diferentes tasas de nucleación, crecimiento y oxidación de la misma manera, con las ecuaciones de tipo Arrhenius a continuación presentadas, pero con diferentes contribuciones.

- En primer lugar, la **tasa de nucleación** en  $kg/(cm^3s)$  se calcula siguiendo la fórmula 3.15.

$$\dot{\omega}_{nuc} = M_S \cdot A_{kn} \cdot e^{-ER_{kn}/T} \cdot C_{C_2H_2} \quad (3.15)$$

Con  $C_{C_2H_2}$  en  $kmol/m^3$ ,  $A_{kn}$  en  $1/s$  y  $ER_{kn}$  en  $K$ .

- Por otro lado, la **tasa de crecimiento superficial** en  $kg/(cm^3s)$  en LFLAM es calculada de acuerdo a la Ecuación 3.16.

$$\dot{\omega}_{sg} = M_S \cdot A_{kg} \cdot e^{-ER_{kg}/T} \cdot \sqrt{A_s} \cdot C_{C_2H_2} \quad (3.16)$$

De nuevo  $C_{C_2H_2}$  en  $kmol/m^3$ ,  $A_{kn}$  en  $1/s$  y  $ER_{kn}$  en  $K$ .  $A_s$  hace referencia al área superficial de partícula de *soot* por unidad de volumen, en unidades de  $m^2/m^3$ , siguiendo la Ecuación 3.17.

$$A_s = \pi \cdot d_p^2 \cdot N_s = \pi \cdot \left( \frac{6Y_s \rho}{\pi \rho_s N_s} \right)^{1/3} \cdot N_s \quad (3.17)$$

- Por último, el término de la **tasa de oxidación** se divide en 3, tal y como se muestra en la Ecuación 3.13: en primer lugar la oxidación producida por la interacción con  $O_2$ , la oxidación producida al interaccionar con  $OH$ , y la oxidación producida por  $O$ , todas ellas en  $mol/(cm^3s)$ . Cada uno de los términos se calcula de una manera diferente.

- En primer lugar, el cálculo de la tasa de oxidación por  $O_2$  depende del submodelo empleado. Para los submodelos 1 y 2 se sigue calculando con una ecuación de tipo Arrhenius de la siguiente forma:

$$\dot{\omega}_{oxO_2} = M_S \cdot A_{kO_2} \cdot T^{0,5} \cdot e^{-ER_{kO_2}/T} \cdot C_{O_2} \cdot A_s \quad (3.18)$$

Mientras que para los submodelos 3,4 y 5, se calcula de una forma más completa:

$$\dot{\omega}_{oxO_2} = M_S \cdot A_s \cdot k_3 \quad (3.19)$$

Siguiendo  $k_3$  la siguiente ecuación:

$$k_3 = \frac{k_A \cdot p_{O_2} \cdot x_A}{1 + k_Z \cdot p_{O_2}} + k_B \cdot p_{O_2} \cdot (1 - x_A) \quad (3.20)$$

$$k_A = 200e^{-15,098/T} \quad (3.21)$$

$$k_Z = 21,3e^{2,063/T} \quad (3.22)$$

$$k_B = 4,46 \cdot 10^{-2} e^{-7,650/T} \quad (3.23)$$

$$k_B = 1,51 \cdot 10^6 e^{-48817/T} \quad (3.24)$$

$$x_A = \left(1 + \frac{k_T}{k_B p_{O_2}}\right)^{-1} \quad (3.25)$$

Siendo  $p_{O_2}$  la presión parcial de oxígeno molecular.

- Por otro lado, los términos de oxidación por  $OH$  y  $O$  se calculan según las siguientes ecuaciones, extraídas de las investigaciones de Fenimore y Jones [34], que los describen:

$$\dot{\omega}_{oxOH} = M_S \cdot A_S \cdot A_{kOH} \cdot \phi_{OH} \cdot T^{-1/2} \cdot p_{OH} \quad (3.26)$$

$$\dot{\omega}_{oxO} = M_S \cdot A_S \cdot A_{kO} \cdot \phi_O \cdot T^{-1/2} \cdot p_O \quad (3.27)$$

Siendo  $p_{OH}$  y  $p_O$  las presiones parciales del  $OH$  y  $O$ , respectivamente, y  $\phi_{OH}$  y  $\phi_O$  lo que se conoce como eficiencias de la colisión, y tendrán los siguientes valores:  $\phi_{OH} = 0,13$  y  $\phi_O = 0,5$ .

Por tanto, la variación entre modelos se da por el valor de las distintas constantes presentadas en este subapartado. En la Tabla 3.2 se resumen el valor de las constantes para cada submodelo.

Constante (unidades de medida)	Submodelo 1 LLJ	Submodelo 2 FJL	Submodelo 3 LGSG	Submodelo 4 LGSG 2	Submodelo 5 LGSG A4
$A_{kn}$ (1/s)	10000	1350000	1000	1000	1000
$ER_{kn}$ (K)	21000	41000	16103	16103	16103
$A_{kg}$	$6 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^4$	$1,75 \cdot 10^4$	$7 \cdot 10^3$	$9 \cdot 10^4$
$ER_{kg}$ (K)	1210	24000	10064	10064	12100
$A_{kO_2}$ (cm/s)	$10^6$	$1,78 \cdot 10^6$	-	-	-
$ER_{kO_2}$ (K)	19680	39000	-	-	-
$A_{kOH}$ $\sqrt{K} \cdot g / (cm^2 \cdot s \cdot atm)$	-	-	127	10.57833	127*12
$A_{kO}$ $\sqrt{K} \cdot g / (cm^2 \cdot s \cdot atm)$	-	-	5.54	11.084955	0
$NC_{min}$ $ergs / (cm^2 \cdot s \cdot K^5)$	100	90000	700	700	100
$NC_{min}$ $ergs / (cm^2 \cdot s \cdot K^5)$	100	90000	700	700	100
$Ca$	9	3	0	0	9
$Cd$	0.55	0.55	0.55	0.5	0.55
$Crad$	$3,3337 \cdot 10^{-3}$	$3,3337 \cdot 10^{-3}$	$3,3337 \cdot 10^{-3}$	$4,243 \cdot 10^{-3}$	$4,243 \cdot 10^{-3}$
$\rho_s$	2	2	2	1.9	2

Tabla 3.2: Resumen constantes para los diferentes modelos de soot implementados en LFLAM

### 3.2.2. CFD

El CFD, o *Computational Fluid Dynamics* es una rama de la mecánica de fluidos que emplea métodos numéricos, modelado matemático y herramientas de software para resolver y analizar problemas que implican flujos de fluidos y fuerzas actuando en ellos.

El CFD está basado en las ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales describen como la presión, velocidad, densidad y temperatura de un fluido en movimiento están relacionadas [35]. Estas ecuaciones son resolubles únicamente en casos muy concretos, en los que las condiciones de contorno aplicadas y las hipótesis asumidas las simplifican. Estos casos, utilizados casi exclusivamente en el campo académico, son de utilidad para la comprensión del comportamiento de los fluidos, pero no sirven para abordar problemas de ingeniería complejos.

Tradicionalmente se ha recurrido al análisis experimental para estudiar los fluidos y extraer in-



formación sobre su comportamiento, interacción con cuerpos, variación de propiedades... sirviéndose de análisis dimensional para concluir correlaciones entre parámetros y propiedades [36]. Sin embargo, estos resultados están supeditados a la calidad de los instrumentos de medida y del experimento diseñado, e incluso en muchas ocasiones resulta imposible la medida de las magnitudes deseadas por inaccesibilidad del flujo o por imposibilidad de reproducción de las condiciones necesarias.

El CFD hace uso de métodos numéricos y algoritmos para resolver esas ecuaciones de conservación de masa, momento y energía que gobiernan el comportamiento de los fluidos. Estas ecuaciones se discretizan y se resuelven de manera iterativa en una malla computacional que representa el dominio físico de interés. Así, las simulaciones CFD permiten obtener información detallada sobre el flujo de fluidos, las distribuciones de temperatura, las concentraciones de especies químicas y otros parámetros relevantes para el estudio de la combustión, entre otros. Esto se logra dividiendo el dominio en pequeños volúmenes de control, donde se aplican las ecuaciones de conservación y se tienen en cuenta las condiciones de contorno y las propiedades físicas y químicas del sistema.

Existen diferentes softwares de CFD, como *Star CCM+* o *Ansys Fluent*. En el contexto de este trabajo, se empleó el software de CFD *Alya* para llevar a cabo la simulación y el análisis de la formación de hollín en quemadores de turbinas de gas. Este software, que no cuenta con una interfaz, sino es únicamente un código ejecutable, ha sido desarrollado por el Centro de Supercomputación de Barcelona. Cuenta con capacidades avanzadas de modelado y simulación en el campo de la dinámica de fluidos. Además, *Alya* es un código de simulación multi-escala y multi-física, por lo que proporciona un entorno robusto y flexible para la resolución de problemas complejos, de distintos campos, permitiendo la simulación de flujos turbulentos, la interacción fluido-estructura y la implementación de modelos de combustión, como el modelo de predicción de hollín que se propone en este estudio. Entre las diferentes físicas resueltas por *Alya* se pueden mencionar: flujos incompresibles/compresibles, mecánica de sólidos no lineales, química, transporte de partículas, transferencia de calor, modelado de turbulencia, propagación eléctrica, etc.

En concreto, se ha hecho uso de los módulos de mecánica de fluidos de *Alya* (combustión, flujo reactivo...). El modelo de combustión empleado en esta herramienta de CFD es el modelo FGM, presentado previamente. Este modelo en concreto consiste, tal y como se ha reflejado en la Figura 3.1 en disponer de una base de datos de *flamelets unidimensionales* calculadas a partir de LFLAM, a diferentes *Strain Rates*, parametrizar estos resultados en función de la fracción de mezcla  $Z$ , y la variable de progreso normalizada,  $C$ , que a continuación se detallará. El modelo de combustión se encargará de leer toda la información termo-química de las tablas detalladas, así como los términos fuente de las dos ecuaciones de transporte del hollín del modelo de este.

Dentro de Alya se han integrado un modelo genérico de ecuaciones de transporte conocido como *mixed-equations*, que permiten transportar cualquier magnitud, facilitando así la implementación del modelo FGM.

Como se ha mencionado, los resultados de los distintos flamelets serán parametrizados en Z y C, por lo que Alya transportará, aunque no exactamente, estas dos magnitudes siguiendo las Ecuaciones 3.28 y 3.29.

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho \cdot \vec{v} \cdot Z}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} [\vec{\tau}_Z] \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \rho Y_C}{\partial t} + \frac{\partial \rho \cdot \vec{v} \cdot Y_C}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} [\vec{\tau}_{Y_C}] + \frac{\partial}{\partial x} [\rho \cdot D \frac{\partial Y_C}{\partial x} \partial x + \dot{\omega}_{Y_C}] \quad (3.29)$$

Realmente Alya transportará Z e  $Y_C$ , pero como  $Y_C$  puede tomar cualquier valor, no se trata de un buen parámetro respecto al que parametrizar. Por ello se decidió emplear la variable C, con el fin de que, del mismo modo que ocurre en Z, este parámetro tomara valores de 0 hasta 1. C hace referencia a la variable de progreso adimensionalizada, que realmente parametriza el *Strain Rate*.

$$C = \frac{Y_c - Y_{c,min}}{Y_{c,max} - Y_{c,min}} \quad (3.30)$$

En esta ecuación, la variable de progreso, representada como  $Y_c$ , se trata de un escalar reactivo que identifica de forma única cada estado de la llama individual a lo largo de esta. Este parámetro es una combinación lineal de los productos de la reacción química, pero tiene infinitas definiciones. Su elección vendrá dada según el uso y las condiciones en las que se quiera emplear.

Por otro lado,  $Y_{c,min}$  corresponde con la solución inerte, es decir, la solución en la que no se produce combustión, sino únicamente la mezcla de los reactivos.  $Y_{c,max}$  corresponde a la curva solución del *Strain Rate* menor calculado, normalmente 1.

Para representar, por tanto, todas las opciones que se pueden dar en un cálculo 2D o 3D con CFD, se representarán todos los *Strain Rates* posibles entre 1 y la extinción. Si representamos la temperatura en la z estequiométrica, valor dado por el propio LFLAM, se puede obtener la representación de la conocida como Curva S, en la Figura 3.2.

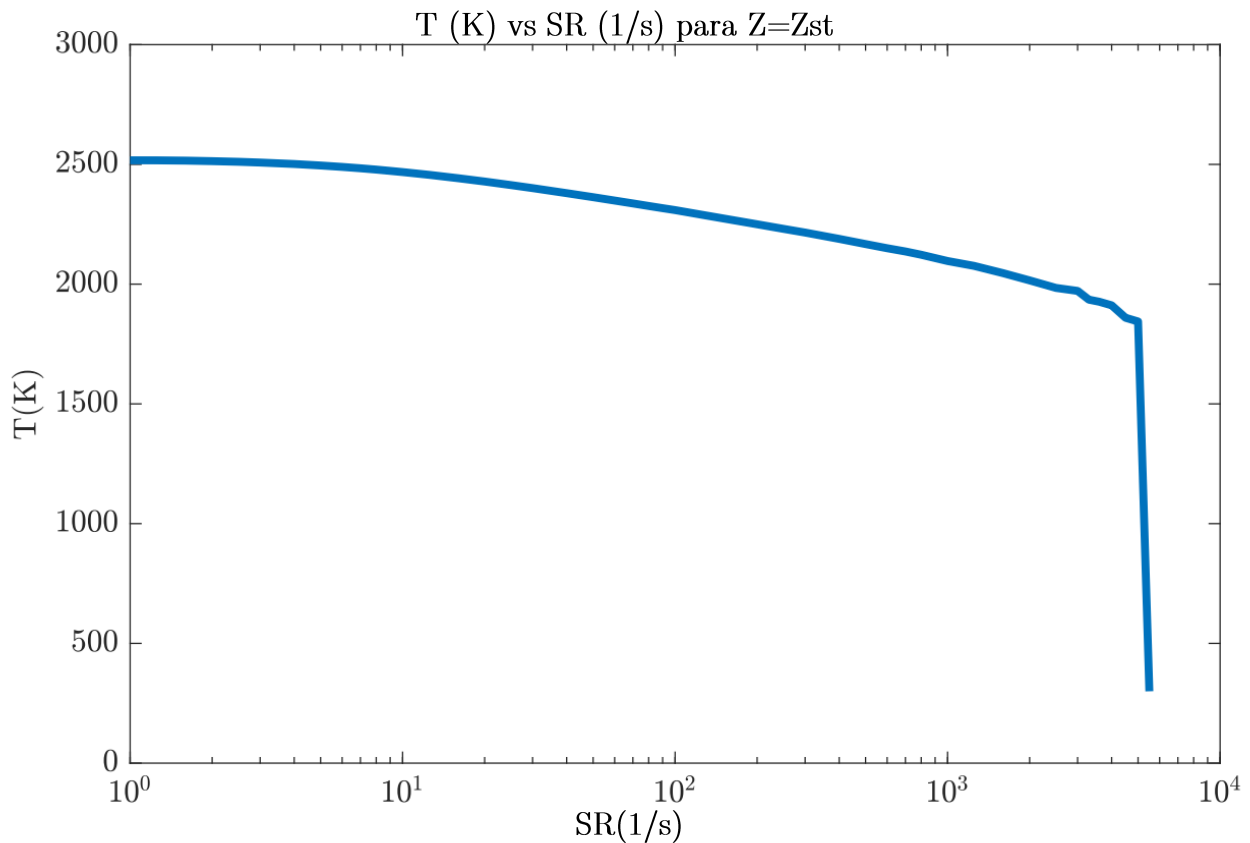


Figura 3.2: Evolución de la temperatura frente al SR para una fracción de mezcla estequiométrica  $Z_{st}$

Como se puede apreciar, el valor máximo de temperatura se da al *Strain* más bajo, 1 en este caso, el que se considerará para la variable de progreso máxima, mientras que la temperatura mínima se da al *Strain* de extinción. En el caso presentado en la Figura 3.2 la extinción se da a un  $SR=5000$ . El paso de la rama superior, conocida en la literatura como rama *Upper*, a la rama inferior, o rama *Inert* se da mediante el *flamelet* de extinción. Este se suele calcular como un *flamelet* transitorio a *Strain* constante. Sin embargo, en el presente trabajo, la parametrización de ese tramo de extinción se ha llevado a cabo mediante la interpolación de los valores del último *Strain* reactivo calculado y el siguiente, que será inerte.

### 3.2.3. MATLAB y ParaView

MATLAB es un software de programación y cálculo numérico empleado principalmente por ingenieros y científicos con el fin de analizar información, desarrollar algoritmos y crear modelos, como es el presente caso.

MATLAB se basa en un lenguaje *matrix-based* que permite la expresión de cálculos matemáticos de una forma natural. Incluye un entorno de escritorio que está optimizado para procesos iterativos de análisis y diseño, y un lenguaje de programación que permite la expresión directa de matrices y

arreglos matemáticos, lo cual será fundamental para el procesado de los datos extraídos de LFLAM.

En el contexto de este trabajo, MATLAB ha sido empleado como una herramienta para realizar procesamiento de datos y visualización de resultados, ya que al trabajar con códigos CFD (1D o 3D) sin interfaz, la única información resultante de los cálculos de estos son matrices numéricas ininterpretables.

A parte de MATLAB, para poder procesar los datos provenientes de los cálculos de Alya ha sido necesario hacer uso del software libre ParaView. Este se utiliza principalmente para visualizar datos científicos complejos y grandes conjuntos de datos en forma de mallas, volúmenes, superficies y campos escalares o vectoriales. Permite explorar y analizar estos datos de manera interactiva, lo que facilita la comprensión y la extracción de información útil. Además, Paraview ofrece una amplia gama de técnicas de visualización, como representaciones 2D, 3D, cortes, contornos o flechas de vector, habiendo sido fundamental para la correcta comprensión de los resultados de este proyecto.

### 3.3. Metodología: Optimización del flujo de trabajo de la herramienta LFLAM

Esta subsección se centra en la optimización del flujo de trabajo de la herramienta LFLAM, concretamente de XLFLAM, resolviendo las ecuaciones de los presentados *flamelets* en el espacio físico. El objetivo de esto es mejorar la eficiencia y la precisión en la predicción de la formación de hollín en quemadores de turbina de gas, estableciendo una rutina tanto de preprocesado, como de cálculo y postprocesado.

La optimización del flujo de trabajo es fundamental para agilizar el proceso de cálculo, reducir los tiempos de simulación y garantizar la calidad de los resultados obtenidos.

Cabe destacar que, tal y como se ha mencionado en su descripción, LFLAM es un código sin interfaz para ninguna de las partes del proceso de trabajo, por lo que clarificar este flujo de trabajo se hace crucial para perpetuar su uso a futuros usuarios de la herramienta.

En esta sección, se abordarán diferentes aspectos del flujo de trabajo de la herramienta LFLAM, desde la preparación de los casos hasta el postprocesado de los resultados. Además, se implementarán técnicas y estrategias específicas para optimizar cada etapa del proceso, asegurando una mayor eficiencia y una mayor fiabilidad de los cálculos realizados.

Se presenta en la Figura 3.3 un diagrama que permite visualizar todo el flujo de trabajo que se ha llevado a cabo alrededor de la herramienta LFLAM. Por un lado los archivos necesarios para hacer el cálculo en LFLAM y por otro lado los archivos que este *software* genera. A partir de estos, se realiza el postprocesado en MATLAB, y la tabulación y consiguiente cálculo en CFD, o el graficado, según lo buscado. Todo este procedimiento se explica a continuación en detalle.

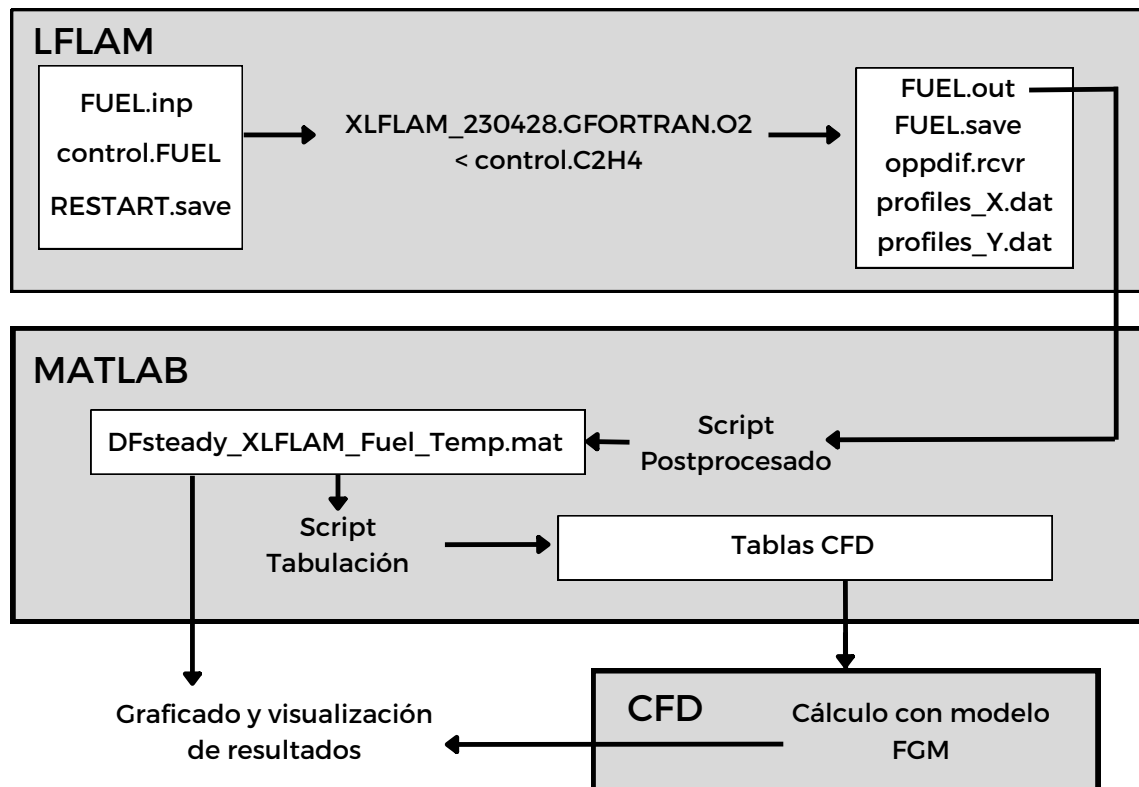


Figura 3.3: Flujo de trabajo alrededor de LFLAM

### 3.3.1. Preparación de casos

Para iniciar un cálculo con LFLAM es necesario contar con dos archivos de texto en una misma carpeta, llamados *FUELNAME.inp* y *control.FUELNAME*. *FUELNAME* será sustituido por el combustible principal en cuestión. En el caso del presente trabajo será prácticamente siempre etileno,  $C_2H_4$ , por lo que se sustituirá por ese nombre, resultando en *C2H4.inp* y *control.C2H4*.

El archivo de texto *control.C2H4* presenta el contenido mostrado en la Figura 3.4:

```
*****
*                               DATA CONTROL                               *
*****
HOME                             :.
HOME2                             :../mech_KM2
CHEMKIN linkfile                   :HOME2/KM2.cklink
TRANSPORT database                 :HOME2/KaustMech2.transp

OPPDIF input file                  :HOME/C2H4.inp
OPPDIF output file                 :HOME/C2H4.out
OPPDIF save file                   :HOME/C2H4.save
OPPDIF flamelet file               :HOME/C2H4.flm
OPPDIF restart file                :HOME/RESTART.save
OPPDIF regrid solut               :HOME/REGRID.save
OPPDIF recover file                :HOME/oppdif.rcvr

*****
*                               END OF DATASET                               *
*****
```

Figura 3.4: Contenido del archivo *control.C2H4*

Como se puede apreciar, este documento incluye las rutas de los diferentes archivos que LFLAM necesita para iniciar el cálculo.

En primer lugar, y siendo lo más importante, el mecanismo a emplear. En el caso del presente trabajo, dado su compromiso entre una detallada descripción de la química y un coste computacional accesible, se hará uso del mecanismo KM2, presentado en la Tabla 2.1. Este se detalla en las líneas 2-4 del documento.

Por otro lado, se debe indicar dónde se encuentra el otro archivo necesario para iniciar el cálculo, el *input*, en la quinta línea del documento, nombrado como se ha presentado anteriormente. También podría darse el caso de que el cálculo no se hiciera desde cero, sino que se empezara a calcular desde otra solución como inicialización, con el fin de necesitar menos iteraciones y acelerar el proceso de cálculo. Si este caso se diera, el archivo con la información de la solución de la que partir se encontraría en un archivo conocido como *RESTART.save*. La ubicación de este archivo se detalla en la novena línea del archivo, pero se recomienda que todos los archivos se encuentren en una misma carpeta, a la que en la línea uno se nombra como *HOME*.

En el resto de líneas escritas del archivo se indican las rutas de los documentos que generará LFLAM al ejecutar el cálculo. El primero de ellos es un archivo *.out* donde se encontrará toda la información de los resultados, la solución final convergida, de la cual se extraerá la información para ser analizada. El archivo *.save* se genera también al ejecutar el cálculo y es en el que se almacena la información necesaria para poder inicializar un cálculo desde la solución del actual. Es por ello que si se quiere hacer este proceso, es necesario copiar en el nuevo caso a ejecutar el archivo *.save* del caso calculado y renombrarlo como *RESTART.save*.

Por último, otro archivo de interés para el usuario es el indicado en la última línea de la Figura 3.4, el archivo *oppdif.rcvr*. Este archivo permite, si es necesario detener el cálculo por cualquier motivo, reanudarlo desde donde se quedó sin necesidad de volver a empezar a calcular. Del mismo modo que con el archivo *.save*, es necesario renombrarlo dentro de la carpeta de trabajo como *RESTART.save* para que realice esa función.

A parte del archivo *control.C2H4*, para poder iniciar el cálculo es necesaria la creación de un archivo *C2H4.inp*, donde se encuentra toda la información referente al caso a calcular.

En la Figura 3.5 se pueden observar las primeras líneas de este extenso archivo.

```

////////////////////////////////////
////////////////////////////////////
/
RSTR
/IRAD 1
SOOT 1
/
PROD O2 0.0057053
PROD OH 0.0070006
PROD H2O 0.2373357
PROD CO 0.0081235
PROD CO2 0.0545281
PROD N2 0.6873068
TMAX 2265. / max temperature, K
/ ==== REGRID? ====
/NORG / no regridding (on continue)
/RGRD
/NPTS 200
/JJRG 100|
JJRG 100
PCAD 0.7 / percentage of regrid points dedicated to adaption
RGTC 1.5 / ratio of gradient regrid points to curvature points
/

```

Figura 3.5: Contenido de las primeras líneas del archivo *C2H4.inp*

Cabe aclarar que en un archivo de este tipo, incluir '/' hace que todo lo que hay escrito tras el carácter no sea leído por LFLAM, como si estuviera comentado.

En la primera línea, con RSTR se indica si hay un archivo desde el que hacer un *RESTART* o no. Si no se comenta esta línea, en la carpeta de trabajo deberá hallarse un archivo *RESTART.save*, en caso contrario, el software no podrá proceder con el cálculo.

En caso de que esté comentado, será necesario guiar la solución. La configuración inicial de LFLAM son dos corrientes contrapuestas de aire y combustible, inertes, a una temperatura de alrededor de 300K, sin ningún tipo de aporte extra de calor. En estas condiciones no se produciría una llama y la solución estacionaria sería una mezcla de ambas corrientes a una temperatura similar a la de estas. Sin embargo, para indicar que realmente la solución estacionaria es una llama, que se ha encendido la mezcla, se emplean las líneas que comienzan con *PROD* y la siguiente a estas, *TMAX*. En ellas, se ha de indicar una aproximación de lo que será el resultado final, no ha de ser un valor preciso, simplemente



debe estar alejado de la solución inerte. Es por ello que se indican valores extraídos de otra solución para las especies y el valor de temperatura máximo de la llama, por encima de los  $2000K$ .

Por otro lado, en la segunda y tercera línea se pueden activar y desactivar modelos empleados en LFLAM. En la segunda línea podemos hacer que el cálculo se realice considerando radiación de la llama al exterior, lo cual disminuirá la temperatura de esta, o sin hacerlo. Por otro lado, en la tercera línea se puede seleccionar si se quiere realizar el cálculo del *soot* producido o si se quiere realizar un cálculo considerando únicamente las especies gas. Además, como se encuentran implementados 5 submodelos, tal y como se ha indicado en la Tabla 3.2, se ha de elegir también, en caso de considerar el hollín, con qué submodelo calcularlo.

Por otro lado, la configuración de lo que se indica como *REGRID* hace referencia al refinado de la malla. En este trabajo se dejarán las opciones por defecto, pero su principal función es controlar como LFLAM refina la malla durante el cálculo en función de sus necesidades, localizando donde se está produciendo mayor error numérico y refinando esa zona.

```
/ ==== MODELS / PROBLEM DEFINITION ===  
/  
XEND 10.0 / flame size, cm (position for end boundary)  
/  
CILN / PROBLEM GEOMETRY  
STRP / TRANSPORT MODEL  
/UNED 1.E-5  
ENRG / ENERGY EQUATION INCLUDED  
HFLX / ENTHALPY FLUX  
/TDIF / THERMAL DIFFUSION  
NOFT / SKIP THE FIXED TEMPERATURE PROBLEM  
/  
/PLUG  
/POTE  
/
```

Figura 3.6: *Problem definition* en el archivo *C2H4.inp*

En la Figura 3.6 se aprecia la parte del archivo en la que se definirán los métodos de resolución adoptados por LFLAM.

En primer lugar, la distancia entre el primer y último punto de la malla, es decir, donde se aplicarán las condiciones de contorno. Al emplearse para resolver llamas de difusión contrapuestas esta distancia sería la distancia real existente entre las salidas de los chorros de combustible y oxidante.

Por otro lado, se define la geometría del problema, generalmente cilíndrica tal y como se encuentra expresado en la Figura 3.6.

Otra configuración determinante, es la expresada por la palabra *UNED*. Si se comenta esta línea, se resolverá el flujo reactivo considerando  $Le = 1$ , es decir, se considerará que todas las especies tienen igual difusión másica y térmica. En caso contrario, se considerará difusión multicomponente, es decir,

el transporte de múltiples especies en un fluido teniendo en cuenta que cada una de ellas tiene un número de *Lewis* distinto.

Las siguientes cuatro líneas escritas hacen referencia a distintos términos o ecuaciones que incluir en la resolución de las llamas de difusión, como el término de difusión térmica en la ecuación de la temperatura.

Por último, las dos últimas líneas hacen referencia a la forma de resolver el problema, con lo conocido como *Plug flow* o *Potential flow*. El primero es un modelo de la mecánica de fluidos que asume que la llama está definida por la velocidad de las corrientes de combustible y oxidante, y que esta es constante en cualquier sección transversal del conducto. Por otro lado, el flujo potencial consiste en considerar que la velocidad del fluido y la definición del problema, en este caso, viene dada por un escalar, el *Strain Rate*, mencionado en secciones anteriores, y que determinará la forma de la llama.

```

/ ===== BOUNDARY CONDITIONS =====
/
/ pressure (in atmospheric pressure)
PRES 1.
/
/ inlet temperatures, K:
TFUE 300.0
TOXI 300.0
/
/ fuel mole fractions ( Zp=0.000 ):
FUEL C2H4 1.0
/
/ oxidant mole fractions ( Zp=0.000 ):
OXID O2 0.25
OXID N2 0.75
/
// new progress variable definition
PROG C02 0.0227
PROG C0 0.0357
PROG H2O 0.0556
PROG H2 0.175
PROG A4 0.0989
PROG O2 -0.0003125
/
/ stoichiometric mixture fraction definition
FUSP C2H4 / fuel species in fuel stream
OXSP O2 / oxidant species in oxidant stream
/
STRN 16.00 / strain rate
/VFUE 20.2
/VOXI 19.8
/

```

Figura 3.7: *Boundary Conditions* en el archivo *C2H4.inp*

En la Figura 3.7 se puede apreciar la continuación del archivo, donde restaría introducir las condiciones de contorno, las cuales definirán el problema.

En primer lugar, la presión de operación y la temperatura a la que inciden los flujos de *fuel* y aire.

Tras ello, es necesario detallar la composición del combustible y del oxidante. Pueden estar compuestos por distintas especies, lo único necesario es indicar la fracción másica de cada componente que compone el combustible u oxidante, y que la suma de todas ellas sea igual uno. En el ejemplo mostrado en la 3.7 se puede ver un combustible compuesto por un único elemento, el etileno, y un oxidante que representa al aire con un 25 % de oxígeno molecular y un 75 % de nitrógeno.

A continuación define lo que se conoce como variable de progreso, previamente explicada y representada. Su elección vendrá dada según el uso y las condiciones en las que se quiera emplear [25] y es en esta zona del código donde se definirá la variable de progreso de interés. Esta variable adquiere gran importancia en el presente trabajo, ya que su definición es fundamental para la implementación del modelo de hollín, tal y como se podrá apreciar en las siguientes secciones.

La definición de variable de progreso se realiza en las líneas indicadas en la Figura 3.7, siendo en el caso del presente trabajo la siguiente:

$$Y_C = 0,0227 \cdot Y_{CO_2} + 0,0357 \cdot Y_{CO} + 0,0556 \cdot Y_{H_2O} + 0,175 \cdot Y_{H_2} + 0,0989 \cdot Y_{A_4} - 0,0003125 \cdot Y_{O_2} \quad (3.31)$$

Es importante escoger una definición de variable de progreso que sea monótona decreciente con el *Strain Rate*, sin ningún tipo de excepción, siendo necesaria su comprobación.

Tras ello, en la Figura 3.7 se puede apreciar que resta definir qué especies de las indicadas como constituyentes de la corriente de combustible son realmente el combustible en sí, y de igual manera con el oxidante, para el cálculo de la fracción de mezcla estequiométrica, es decir, la cantidad ajustada según la reacción necesaria de cada reactivo.

Por último, queda definir cómo será la llama. Esto se realizará con el *Strain Rate* en caso de que se resuelva el problema con *Potential Flow*, o indicando las velocidades de los chorros en caso de que se resuelva con *Plug Flow*. Es importante que únicamente se indique una de las dos condiciones, a pesar de que si se descomentan ambas por error, el *Strain Rate* siempre prevalecerá.

```

/ ===== SOLVER PARAMETERS =====
/
WDIF          / windward differencing
// CDIF       / central differencing
// HDIF       / hybride differencing
SFLR -1.E-6   / lower species bound --> upper species bound = 1+SFLR
/
/ -- NEWTON (steady-state) solver [TWOPNT] --
ATOL  1.E-6   / absolute Newton iteration convergence criteria
RTOL  1.E-3   / relative newton iteration convergence criteria
NJAC  1       / retirement age of Jacobian during Newton
/
/ -- NEWTON (transient) solver [TWOPNT] --
ATIM  1.E-6   / absolute newton convergence criteria for timesteps
RTIM  1.E-3   / relative newton convergence criteria for timesteps
TJAC  50      / retirement age of Jacobian during time stepping
DTMN  1.E-10  / minimum timestep
DTMX  1.E-2   / maximum timestep
ISTP  0       / initial time steps before newton
TIME  50  1.E-5 / time step starting procedure
TIM2  50  1.E-5 / time stepping, after adding the energy equation
IRET  50      / retirement period before increasing timestep
UFAC  2.0     / timestep increase when timestep does not change solution
DFAC  2.2     / timestep decrease when newton fails convergence on timest
/
/ -- adaptive mesh criteria [TWOPNT] --
ADAF  1.E-8   / significance mesh refinement parameter
NADP  100     / max number of mesh points added at refine step
GRAD  0.04   / gradient mesh adaption parameter
CURV  0.2    / curvature mesh adaption parameter
// ACTV N2    / species variables active on mesh refinement
// NNAC      / all species variables non active on mesh refinement
/
/
/ ===== PRINT OUT =====
PRNT  1
NPRT  1000   / number of maximum points printed
/ printed species (maximum 10):
KOUT  C2H4 O2 N2 CO2 H2O CO CH2O OH C2H2 A4
/KOUT  C2H4 O2 CO H2O CO2 N2 H2 OH C2H2 H
TSTC          / monitor stoichiometric temperature (instead of Tmax)
/
/
/
CNTN
END

```

Figura 3.8: *Solver Parameters* en el archivo *C2H4.inp*

En la Figura 3.8 se puede observar el fin del documento que lee LFLAM para realizar los cálculos. Este hace referencia al método empleado para resolver numéricamente las distintas ecuaciones, así como la malla adaptativa y los criterios para realizar la adaptación. Todo esto se detallará en el próximo subapartado.

Por último, se puede apreciar un apartado de *Print Out*. En este se puede decidir que especies, de las calculadas con el mecanismo seleccionado, se quieren extraer en el archivo de salida, el archivo *.out*.

### 3.3.2. Cálculo

Para iniciar el cálculo con LFLAM, una vez configurado todo lo mencionado en el subapartado anterior, solo es necesario introducir el siguiente comando en la consola:

```
XLFLAM_230428.GFORTRAN.O2 <control.C2H4
```

Al ejecutarlo, se crean directamente los archivos *.out*, *.save* y *oppdf.rcvr*, que irán sobrescribiéndose conforme se alcancen las soluciones convergidas del cálculo.

Una vez iniciado el cálculo, aparece por consola lo mostrado en la Figura 3.9.

```
ENRG not required anymore
FUSP not used anymore...
OXSP not used anymore...
Using Le=1 transport (STRP).
Read Heigenv = -5.7051886282895703
Regridding to 200 points
→ use variable TEMPERATURE
(REGRID) xstag around 0.34773869346733671
CYLINDRICAL GEOMETRY
PLUG FLOW
Imposed Vfuel = 20.199999999999999
Imposed Voxid (target) = -19.800000000000001
. strain rate (formula) = 101.25199485751298
(GET_JFIX) xstag = 0.34773869346733666
Stoichiometric mixture fraction: 0.183088
CALL newton (steady) 200 points.
```

Figura 3.9: Impresión por consola al iniciar el cálculo

Se puede observar como en todas las líneas mostradas se han realizado los primeros cálculos para la correcta ejecución de los modelos, así como la lectura de cuáles se van a emplear.

En el caso mostrado, se utiliza  $Le = 1$ , una geometría cilíndrica y se considera *Plug Flow*, con una velocidad de 20.2 m/s para el *fuel* y 19.8 m/s para el oxidante, que indica de signo contrario por su opuesta dirección. También aparece el *Strain Rate* que resulta de calcularlo con las velocidades impuestas, así como la fracción de mezcla estequiométrica fruto de la composición de combustible y oxidante indicada en el archivo de *input*.

Tras ello, indica el *solver* que se va a emplear, Newton estacionario, considerando pues el criterio de convergencia especificado en la Figura 3.8. Esto se debe a que FLAM hace un doble refinamiento de la solución. En primer lugar, hace un cálculo con una tolerancia mayor (menos restrictiva), indicada en la Figura 3.8, de  $10^{-6}$ . Tras conseguir la solución convergida, vuelve a iniciar el cálculo desde esa solución para conseguir unos resultados más precisos, con una tolerancia de  $10^{-9}$ .

```

CALL newton (steady)          200 points.
      diverge → exit Newton, nNewton =      5
Plug flow: iterate to match east boundary.  1.3192077702576244E-002
CALL timstp          200 points.  dt =  1.0000000000000001E-005
nsteps  T_STOIC      dt          SUM(dt)  npts  name_max_res  imax  max_res
  1  2042.05  1.0000E-05  1.0000E-05  200  TEMPERATURE  182  3.7461E+00
  2  2042.01  1.0000E-05  2.0000E-05  200  TEMPERATURE  123  2.0489E+00
  3  2041.98  1.0000E-05  3.0000E-05  200  TEMPERATURE  142  1.7878E+00
  4  2041.94  1.0000E-05  4.0000E-05  200  G-FUNCTION   90  1.6429E+00
  5  2041.92  1.0000E-05  5.0000E-05  200  G-FUNCTION   90  1.7226E+00
  6  2041.89  1.0000E-05  6.0000E-05  200  G-FUNCTION   90  1.8160E+00
  7  2041.87  1.0000E-05  7.0000E-05  200  G-FUNCTION   90  1.9151E+00
  8  2041.84  1.0000E-05  8.0000E-05  200  G-FUNCTION   90  2.0172E+00
  9  2041.82  1.0000E-05  9.0000E-05  200  G-FUNCTION   90  2.1212E+00
 10  2041.80  1.0000E-05  1.0000E-04  200  G-FUNCTION   91  2.2295E+00
 11  2041.78  1.0000E-05  1.1000E-04  200  G-FUNCTION   91  2.3395E+00

```

Figura 3.10: Impresión por consola de los residuales

En la Figura 3.10 se puede apreciar lo que se muestra en consola al empezar a calcular propiamente. En primer lugar, el número de *steps* que se han dado, tras ello, el valor de la temperatura en el punto de fracción de mezcla estequiométrica indicada antes, así como el diferencial de tiempo considerado. Las tres últimas columnas hacen referencia a los residuales. LFLAM muestra cuál es el residual más alto, a qué parámetro corresponde y de cuánto es su valor.

Por último, en la Figura 3.11 se puede apreciar el refinamiento del cálculo previamente comentado. Cuando LFLAM alcanza una solución con la primera tolerancia, continúa con un nuevo problema y recalcula la solución con la nueva tolerancia. Estas tolerancias se pueden ajustar en función de la precisión necesitada.

Así, en la última línea se puede apreciar lo que indica que se trata de la solución final.

```
TWOPNT: Success. Boundary value problem solved.

////////// continuing to new problem //////////
////////// continuing to new problem //////////
////////// continuing to new problem //////////

keyword input

/
NORG
SFLR -1.E-9
ATOL 1.E-9
RTOL 1.E-6
ATIM 1.E-9
RTIM 1.E-6
END
Stoichiometric mixture fraction: 0.074578
Stoichiometric mixture composition:
Y_N2 0.67022836897067817
Y_O2 0.25519340017854419
Y_C2H4 7.4578230850777583E-002

INIT_TWOPNT: Two-Point Boundary Value Problem Solver,
              Version 2.22 of September 1990 by Dr. Joseph F. Grcar.

              DOUBLE PRECISION
              permit mesh refinement

TWOPNT: Calling NEWTON to solve the steady-state problem.

TWOPNT: Calling REFINE to adapt the mesh.

TWOPNT: Final solution:
```

Figura 3.11: Impresión por consola del fin del primer refinado

```

35 2039.59 3.8467E-03 1.1330E+00 492 TEMPERATURE 332 9.7770E-08
36 2039.59 3.8467E-03 1.1330E+00 492 TEMPERATURE 332 9.7770E-08
Plug flow: east boundary ok. 4.9656105804540829E-005
CALL newton (steady) 492 points.
→ newton converged (2), nNewton = 1
Plug flow: east boundary ok. 2.5118134506785239E-005
npoints = 492
T_max = 2111.3072227442412 / T_stoic = 2040.3881196233094
Yc_stc = 2.0832328666190121E-002
Strain rates:
. |dUdx|_stag = 242.0333 at xstag = 0.34747592
. |dUdx|_max = 338.7494 at x-xstag = 0.07575067
. |dUdx|_lcl = 233.7583 at x-xstag = 0.10329293
global strain rate (formula) = 101.25075150985489

Continue calculation

Using Le=1 transport (STRP).
CYLINDRICAL GEOMETRY
PLUG FLOW
Imposed Vfuel = 20.199999999999999
Imposed Voxid (target) = -19.800000000000001
. strain rate (formula) = 101.25199485751298
(GET_JFIX) xstag = 0.34747592044180281
Stoichiometric mixture fraction: 0.183088
CALL newton (steady) 492 points.
→ newton converged (2), nNewton = 9
Plug flow: east boundary ok. 1.7689104399143396E-005
npoints = 492
T_max = 2111.2039252269365 / T_stoic = 2039.9779743421570
Yc_stc = 2.0828205956780192E-002
Strain rates:
. |dUdx|_stag = 242.0790 at xstag = 0.34744418
. |dUdx|_max = 338.8323 at x-xstag = 0.07578241
. |dUdx|_lcl = 234.3171 at x-xstag = 0.10332467
global strain rate (formula) = 101.25111924684522

```

Figura 3.12: Impresión por consola del fin de cálculo

Por último, es necesario asegurar que el cálculo ha finalizado. LFLAM siempre procede de la misma forma, por lo que cuando esto ocurre se muestra algo similar a la Figura 3.12. En ella se puede ver tanto la temperatura global máxima, como el *Strain Rate* global calculado, cuyo valor debe ser comprobado con lo impuesto al inicio, así como el resto de configuraciones previamente explicadas que también aparecerán en este último paso del cálculo.



### 3.3.3. Postprocesado

Tras ejecutar y finalizar el cálculo, se generarán distintos ficheros. De entre todos ellos, el fichero *.out* será el que resulte de un mayor interés. Este es un fichero de texto en el que se almacena toda la información relativa a las especies, las constantes termodinámicas...

Además, es posible modificar el código de LFLAM para que en dicho archivo se guarden más o menos variables, tarea que ha sido necesaria llevar a cabo en numerosas ocasiones durante la realización del presente proyecto.

#### 3.3.3.1. Postprocesado de un caso simple

Para poder tratar la información guardada en el fichero de *output* es necesario transformarla con el fin de que deje de tratarse de un archivo de texto. Para ello, ha sido creada la función *lectura\_archivo*, mostrada en el Anexo A.

A esta función se le debe indicar el *.out* que se quiere postprocesar y, tras buscar y almacenar la información de una forma concreta, guardará 5 matrices con toda la información sobre la llama.

Cabe destacar que se tomará únicamente la segunda solución, la solución más refinada. Además, la última matriz, *block5*, únicamente existirá en aquellos casos en los que se calcule el *soot*, ya que en esta se almacenan principalmente los términos fuente de los diferentes procesos de la formación de hollín existentes. Además, se almacenarán valores de interés para poder realizar comparativas entre casos, como el *Strain Rate*, la temperatura del combustible o el submodelo de hollín empleado.

Esta función almacena matrices de forma temporal, es por ello que en los Anexos B y C se pueden apreciar dos *scripts*, cuyas diferencias se explicarán a continuación, que hacen uso de esta función.

En primer lugar, el *script* del Anexo B ha sido programado para leer un único caso, cuando son sus datos los que se quieren almacenar. Es por ello que el *input* de este es directamente el archivo *.out* que genera LFLAM al realizar un cálculo. Haciendo uso de la función *lectura\_ficheros* extrae 5 matrices en las que queda almacenada toda la información del caso refinando además en la zona donde se considera que se encuentra la mayor variación de propiedades e interpolando todos los resultados en esta zona. Tras ello, se guarda toda la información en una estructura de MATLAB a la que se ha llamado *flameletDF*, donde cada campo es una de las variables resultado de LFLAM. Esta estructura contenedora de todos los campos, será almacenada en un archivo *.mat* con el nombre del combustible empleado, la temperatura de este, el *Strain Rate* al que se ha realizado el cálculo y el submodelo de hollín empleado.

Por otro lado, en el Anexo C se hace básicamente lo mismo que en el caso anterior, pero para un conjunto de casos. Estos deben estar almacenados cada uno en una carpeta, y todas ellas dentro de una misma, que será el directorio a analizar. El nombre de estas es indistinto ya que el *script* reconocerá

el tipo de directorio, así como buscará dónde se encuentra el archivo de interés, *.out*, en cada carpeta. Tras ello, realizará el refinado de la malla en la zona donde haya más variación de propiedades en el primer caso, y lo mantendrá para el resto de estos, con el fin de evitar problemas en el graficado. Las matrices que serán guardadas en la estructura se van construyendo conforme se leen los archivos en las distintas carpetas y, una vez finalizado el proceso de extracción de información, esta se almacena de la misma manera que en el Anexo B.

Finalmente, tras la creación de los archivos *.mat* donde se almacena toda la información organizada, se ha programado también como parte de este trabajo un *script* interactivo mostrado en el Anexo D que permite mostrar tantas gráficas como se necesiten, comparando o no con datos experimentales que se tengan.

### 3.3.3.2. Cálculo de la rama *Upper* y extinción

La tabulación de las *flamelets*, que se usarán en posteriores casos CFD, requiere los cálculos de *flamelets* en todo el rango posible de *Strain Rates*. Tal como se ha mostrado en la Figura 3.2, este rango está definido por una rama superior, que aquí se llamará '*Upper*', cuya temperatura decrece con el aumento de SR, para terminar en un valor de SR (denominado de extinción) donde la temperatura cae bruscamente.

Previamente se han presentado los cálculos necesarios a realizar para poder abarcar todas las posibles opciones que se pueden dar durante un cálculo 3D en CFD. Como se puede apreciar en la Figura 3.2, son necesarios hacer todos los cálculos posibles desde el *Strain Rate* más bajo, hasta el punto de extinción.

El cálculo de toda la rama superior, conocida como rama *Upper* se llevará a cabo de forma automática, mediante el *script* descrito en el Anexo E. En este, será necesario indicar la ruta '*home*' donde se encuentra la carpeta *Upper*.

Por tanto, antes de poder ejecutar el *script*, es necesario contar con una estructura concreta de carpetas. En primer lugar, será necesario tener una carpeta principal donde se encuentre el mecanismo químico, el *script* del Anexo E, un vector, *SRvector*, que indicará a qué *Strains* se van a realizar los cálculos, y una carpeta *Steady*, en la que deben encontrarse dos carpetas diferenciadas, *Inert* y *Upper*. En ellas se almacenarán los diferentes casos correspondientes a cada zona de la Figura 3.2. En el presente trabajo se empleará el siguiente vector SR (1/s):

[1.25, 1.6, 2, 2.5, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12.5, 16, 20, 25, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 125, 160, 200, 250, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000, 1250, 1600, 2000, 2500, 3000, 3300, 3600, 4000, 4300, 4600, 5000, 5300, 5550, 6000]

Además, dentro de la carpeta *Upper*, será necesario contar con la carpeta de uno de los *Strains*, generalmente el primero, con los archivos de preproceso listos y el caso configurado como se necesite. En esta carpeta *Upper* se crearán todas las carpetas de los diferentes cálculos que se realizarán de forma automática. Cabe destacar que el *script* del Anexo E copiará los archivos *input* del que se haya detallado en la carpeta *Upper*, con el fin de copiar toda la configuración, cambiando únicamente el *Strain Rate* al que se calculará.

Por tanto, una vez conseguida la configuración explicada, se puede ejecutar el *script*. Al hacerlo, se generarán tantas carpetas como elementos tenga el vector SR y se creará dentro de la carpeta *Steady* un ejecutable, o *bash*, un comando de linux encargado de interactuar directamente con el sistema operativo del ordenador. El contenido de este archivo, cuyo nombre será *02a\_script\_run\_Uppermulti\_all.sh*, se puede apreciar en la Figura 3.13.

```
cd Upper
cd SR05000; XFLAM_230428.GFORTRAN.02 < control.C2H4 &> log; BACK_PID=$!; wait $BACK_PID
cd ../SR05300; rm *.save; ln -s ../SR05000/C2H4.save RESTART.save; XFLAM_230428.GFORTRAN.02 < control.C2H4 &> log; BACK_PID=$!; wait $BACK_PID
cd ../SR05550; rm *.save; ln -s ../SR05300/C2H4.save RESTART.save; XFLAM_230428.GFORTRAN.02 < control.C2H4 &> log; BACK_PID=$!; wait $BACK_PID
cd ../SR06000; rm *.save; ln -s ../SR05550/C2H4.save RESTART.save; XFLAM_230428.GFORTRAN.02 < control.C2H4 &> log; BACK_PID=$!; wait $BACK_PID
```

Figura 3.13: Archivo *bash* para iniciar el cálculo

Tal y como se puede ver, este ejecutable realiza el cálculo individual de cada *Strain* partiendo de la solución del caso inmediatamente anterior. En un principio, estaba configurado para que se diera inicio con el primer caso, a  $SR=1$  (1/s) y que aumentara hasta  $SR=6000$  (1/s). Tras realizar este proceso numerosas veces, se decidió cambiar la estrategia y tratar de agilizar el proceso de cálculo.

Los *Strain Rates* más bajos son los más costosos de calcular, ya que la llama se encuentra localizada en una zona mucho más estrecha, donde los gradientes serán mucho más abruptos. Así, iniciar el cálculo desde un SR pequeño no resulta óptimo y llega a triplicar el tiempo de cálculo, incluso llegando a no converger en algunas situaciones. Por ello, en el presente trabajo se decidió partir de un *Strain* medio, un valor de 125 (1/s), y calcular el resto de los casos en base a este, tanto para valores de SR superiores como inferiores, permitiendo también el cálculo de dos casos al mismo tiempo, ya que ambos parten de la misma solución y son independientes entre ellos.

Finalmente, la jeralquía que debe quedar para poder realizar un correcto cálculo es la mostrada en la Figura 3.14, con el *script* de MATLAB y el vector de *Strains* al mismo nivel que la carpeta *Steady*, y el ejecutable dentro de esta misma carpeta.

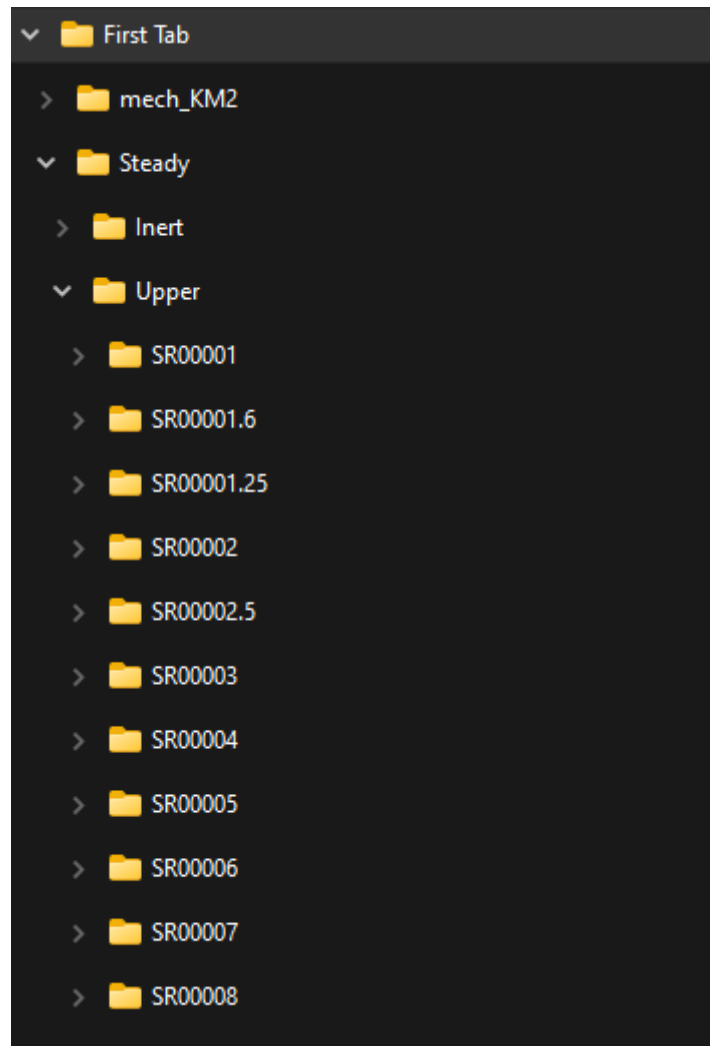


Figura 3.14: Jeralquía final carpetas para el correcto cálculo

## Capítulo 4

# Validación del modelo de predicción de hollín

El capítulo 4 se centra en la validación del modelo de predicción de hollín implementado en la herramienta LFLAM. La validación desempeña un papel crucial en la investigación científica, ya que permite evaluar la precisión y la confiabilidad de los modelos teóricos mediante la comparación con datos experimentales. En el caso de la predicción de la formación de hollín en quemadores de turbinas de gas, la validación del modelo es fundamental para asegurar su aplicabilidad y utilidad en la práctica.

En esta sección, se llevará a cabo un riguroso proceso de validación para evaluar la capacidad del modelo de predicción de hollín en LFLAM para reproducir de manera precisa los fenómenos observados en condiciones reales de combustión. Se compararán los resultados numéricos obtenidos con los datos experimentales disponibles en la literatura y se realizará un análisis detallado de las discrepancias encontradas. Este proceso va a ser crucial para encontrar el modelo que mejor predice la producción de hollín entre los 5 presentados, e incluso para proponer variaciones de este que permitan aproximar mejor los resultados numéricos a la realidad.

### 4.1. Metodología de validación

La validación del modelo de dos ecuaciones de hollín implementado en LFLAM será llevada a cabo mediante una extensa comparativa con datos experimentales de la literatura, concretamente de dos experimentos completos llevados a cabo en los últimos años, y conocidos como experimentos de Gleason [37] y llama WRC15 [24]. Cabe destacar que se va a llevar a cabo la validación de los 5 submodelos propuestos en la Tabla 3.2 simultáneamente para comprobar también cual es el que mejor se ajusta a la realidad.

#### 4.1.1. Casos experimentales de validación

El caso principal que será empleado para la validación es la configuración de Gleason [37]. La elección de este trabajo experimental como método de validación de los cálculos numéricos radica en la amplia variación de condiciones llevada a cabo durante el experimento, tanto en la composición del oxidante y del combustible, como en la presión de trabajo. Esto permite validar el modelo en diferentes condiciones y asemejarlas a las condiciones que se dan en la cámara de combustión de un aerorreactor real.

Este experimento [37] fue llevado a cabo en el año 2021, en el Centro de Yale para estudios de Combustión, en Estados Unidos. Se trata de un quemador *counterflow*, productor del mismo tipo de llamas que LFLAM calcula, lo cual lo hace idóneo para la validación. Este quemador consiste en dos toberas idénticas, convergentes a una salida con un diámetro interno de 6.35 mm. Estos están separados por una distancia de 8 mm. Flujos calibrados de mezclas de nitrógeno y etileno y nitrógeno y oxígeno son alimentados desde la tobera interior a la superior, respectivamente. Las condiciones de contorno del experimento se expresan en la Tabla 4.1, tanto la fracción molar y la velocidad media de las corrientes, como la temperatura máxima de llama resultante. Todas las condiciones se han establecido con intención de tener una fracción de mezcla estequiométrica constante e igual a 0.183, y un *Strain Rate* global también constante, el cual será calculado más adelante.

Cabe destacar que en la propia descripción del experimento se recalca que todas las llamas están muy próximas al eje del quemador (verificado con imágenes digitales), por lo que serán tratadas como llamas unidimensionales, siendo por lo tanto plenamente descritas por los resultados obtenidos en un software de cálculo como LFLAM. La variación de presión de 0.101 MPa a 0.405 MPa y 0.811 MPa permitirá estudiar el efecto de la temperatura y la presión en la formación y crecimiento de hollín. No se tienen mediciones de hollín de todas las configuraciones presentadas en la Tabla 4.1, únicamente de las configuraciones resaltadas.

Para medir el hollín se han llevado a cabo mediciones de dispersión de luz plana con un láser Nd:YAG pulsado de 10 ns (New Wave Gemini PIV). Una lente cilíndrica da forma al rayo láser en una hoja de 4 mm x 1 mm en el centro del quemador con la fluencia del láser mantenida por debajo de 100 mJ/cm<sup>2</sup> para garantizar que los pulsos de alta energía no eliminen las partículas de hollín.

	$T_{ad}$ (K)	Fuel Stream ( $T_f = 298$ K)			Oxidizer Stream ( $T_{ox} = 323$ K)		
		$C_2H_4$	$N_2$	$V_{avg}$ (cm/s)	$O_2$	$N_2$	$V_{avg}$ (cm/s)
0.101 MPa	1922	0.305	0.695	20.2	0.211	0.789	19.8
	1960	0.315	0.685	20.2	0.218	0.782	19.8
	<b>2013</b>	<b>0.330</b>	<b>0.670</b>	<b>20.2</b>	<b>0.229</b>	<b>0.771</b>	<b>19.8</b>
	<b>2063</b>	<b>0.345</b>	<b>0.655</b>	<b>20.2</b>	<b>0.240</b>	<b>0.760</b>	<b>19.8</b>
	<b>2113</b>	<b>0.360</b>	<b>0.640</b>	<b>20.2</b>	<b>0.250</b>	<b>0.750</b>	<b>19.8</b>
	<b>2160</b>	<b>0.375</b>	<b>0.625</b>	<b>20.2</b>	<b>0.261</b>	<b>0.739</b>	<b>19.8</b>
	<b>2207</b>	<b>0.390</b>	<b>0.610</b>	<b>20.2</b>	<b>0.272</b>	<b>0.728</b>	<b>19.8</b>
0.405 MPa	1665	0.225	0.775	20.1	0.155	0.845	19.9
	1721	0.235	0.765	20.1	0.162	0.838	19.9
	1775	0.245	0.755	20.1	0.168	0.832	19.9
	1826	0.255	0.745	20.1	0.176	0.824	19.9
	<b>1875</b>	<b>0.265</b>	<b>0.735</b>	<b>20.1</b>	<b>0.183</b>	<b>0.817</b>	<b>19.9</b>
	<b>1923</b>	<b>0.275</b>	<b>0.725</b>	<b>20.1</b>	<b>0.190</b>	<b>0.810</b>	<b>19.9</b>
	<b>1970</b>	<b>0.285</b>	<b>0.715</b>	<b>20.1</b>	<b>0.197</b>	<b>0.803</b>	<b>19.9</b>
	<b>2016</b>	<b>0.295</b>	<b>0.705</b>	<b>20.1</b>	<b>0.204</b>	<b>0.796</b>	<b>19.9</b>
0.811 MPa	1556	0.205	0.795	20.1	0.140	0.860	19.9
	1635	0.215	0.785	20.1	0.147	0.853	19.9
	1696	0.225	0.775	20.1	0.155	0.845	19.9
	1754	0.235	0.765	20.1	0.161	0.839	19.9
	<b>1809</b>	<b>0.245</b>	<b>0.755</b>	<b>20.1</b>	<b>0.168</b>	<b>0.832</b>	<b>19.9</b>
	<b>1862</b>	<b>0.255</b>	<b>0.745</b>	<b>20.1</b>	<b>0.176</b>	<b>0.824</b>	<b>19.9</b>
	<b>1914</b>	<b>0.265</b>	<b>0.735</b>	<b>20.1</b>	<b>0.183</b>	<b>0.817</b>	<b>19.9</b>

Tabla 4.1: Temperatura máxima de llama calculada y condiciones de contorno del experimento de Gleason. Remarcados los casos de los que se tomaron mediciones de hollín

Por otro lado, con el fin de poder contrastar los resultados con experimentos diferentes y ampliar el rango de validación de los resultados de LFLAM, se contrastarán estos con la mencionada llama WRC15 [24]. Este experimento, llevado a cabo en 2015, consiste en la simulación y experimentación de llamas de difusión de *counterflow*, de etileno y mezclas binarias de etileno con otros hidrocarburos como metano o etano.

El *setup* del experimento consistía en dos toberas contrapuestas con un diámetro de 10 *mm* y una separación entre ellas de 8 *mm*. La velocidad de salida de ambos flujos es de 20 *cm/s*. La corriente de oxidante está compuesta de un 75 % de  $N_2$  y un 25 % de  $O_2$ , mientras que la corriente de combustible es etileno puro para el caso base y 95 % etileno y 5 % propano, etano o metano para los casos binarios. Se resume esta configuración en la Tabla 4.2

	Fuel Stream ( $T_f = 323$ K)			Oxidizer Stream ( $T_{ox} = 323$ K)		
	$C_2H_4$	$C_3H_6$	$V_{avg}$ (cm/s)	$O_2$	$N_2$	$V_{avg}$ (cm/s)
0.101 MPa	0.95	0.05	20	0.25	0.75	20

Tabla 4.2: Temperatura máxima de llama calculada y condiciones de contorno del experimento WRC15

En este experimento se midieron la fracción volumétrica de hollín, el tamaño medio y el *number density* mediante extinción de luz y un sistema de dispersión, *scattering*. La línea de visión se midió con un láser inducido incandescente, LII, con una longitud de onda de excitación de 532 *nm*.

#### 4.1.2. Correcciones numéricas

Para poder llevar a cabo tal número de casos, es necesario optimizar al máximo el proceso de cálculo descrito en la sección anterior. Como ejemplo, se explica a continuación dicho procedimiento para el primer caso en el que se analizará *soot*, el caso a 2013K y 0.101 MPa. En LFLAM se introducirán las condiciones de contorno correspondientes, mostradas en este caso en la Tabla 4.1

En primer lugar, teniendo en cuenta que los experimentos están definidos por la velocidad de las corrientes de oxidante y combustible, esto se corresponde con la configuración *Plug Flow* presentada en la sección anterior. Sin embargo, esta forma de cálculo es mucho más costosa que el *Potential Flow*. Ambas configuraciones han sido previamente definidas en el Apartado 3.3.1. Por ello, se tratará de, tras calcular el caso sin hollín con *Plug Flow*, encontrar el *Strain Rate* global equivalente que en configuración de *Potential Flow* simule a la perfección la solución definida con velocidades (*Plug*). Al hacer esto, la curva quedará perfectamente definida, pero será necesario desplazarla espacialmente comparando el perfil de temperatura.



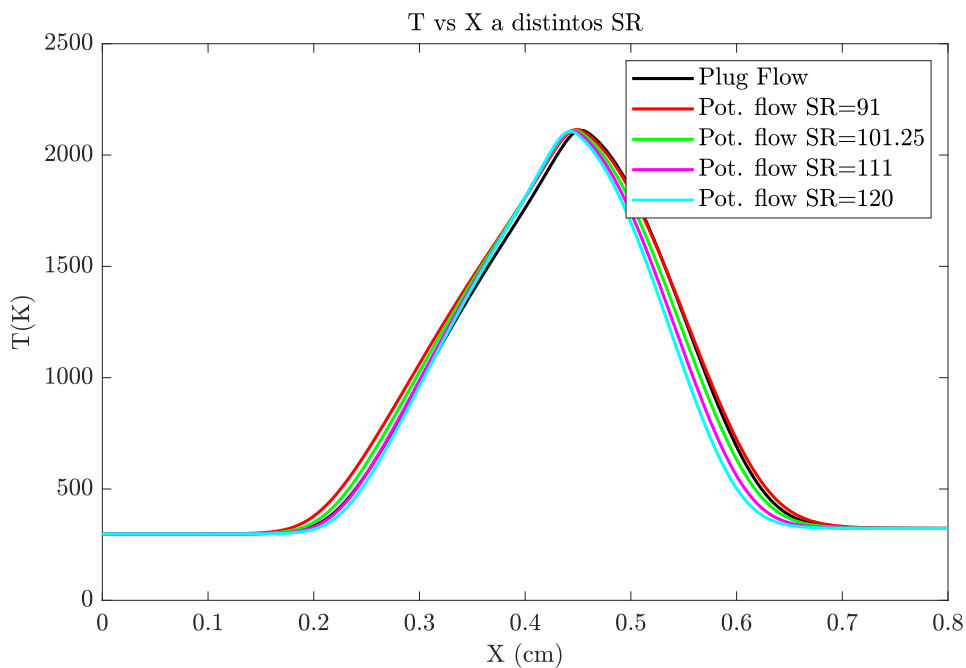


Figura 4.1: Comparativa perfil de temperatura Plug Flow vs Potential Flow a diferentes SR (1/s)

Tal y como se puede apreciar en la Figura 4.1, la diferencia entre los numerosos y diferentes *Strain Rates* es sutil, pero sí que provoca que el perfil no sea exactamente igual. Sin embargo, tras hacer un análisis exhaustivo y único para cada SR, se llega a la siguiente conclusión.

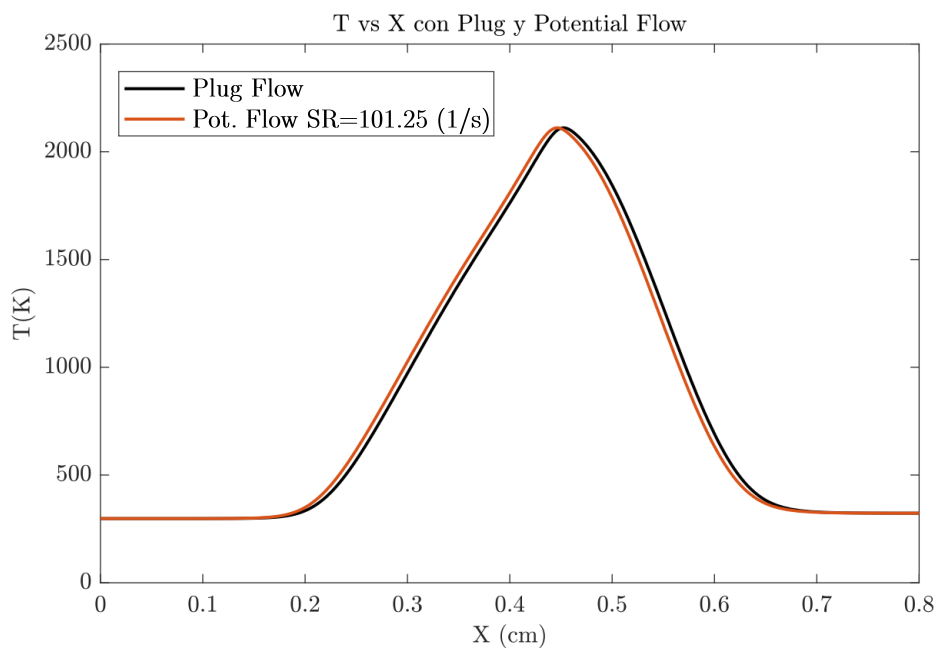


Figura 4.2: Comparativa perfil de temperatura Plug Flow vs Potential Flow SR=101.25 (1/s)

En la Figura 4.2 se puede ver la comparativa para  $SR= 101.25$  (1/s). Se puede apreciar claramente que la curva es prácticamente idéntica, pero debe ser desplazada para representar la llama de forma precisa. Concretamente habrá de desplazarse hacia la derecha **0.0061 cm**. De este modo, podrán realizarse todos los cálculos de la llama calculada, correspondiente a la fila 3 de la Tabla 4.1, con flujo potencial a  $SR=101.25$  (1/s). Teniendo en cuenta que en el propio experimento se indica que todas las condiciones tienen el mismo *Strain Rate*, se tomará esta misma configuración para todos los casos a una atmósfera, donde la velocidad de las corrientes no varía, y se repetirá todo este proceso para 4 y 8 atmósferas.

Tras aclarar cual será la modificación necesaria hacer en el postprocesado, se compararán con los resultados experimentales todas las especies de este mismo primer caso para corroborar la precisión de los cálculos de la fase gas de LFLAM, ya que el cálculo de estos se puede realizar sin el modelo de hollín. Sin embargo, para poder hacerlo de una forma correcta es necesario ajustar la curva en el espacio, de la misma manera que al comparar *Plug* y *Potential Flow*. Si no se hiciera esta corrección, habría un desfase muy notable, claramente visible en la Figura 4.3 ya que las medidas proporcionadas en los datos experimentales toman una referencia distinta.

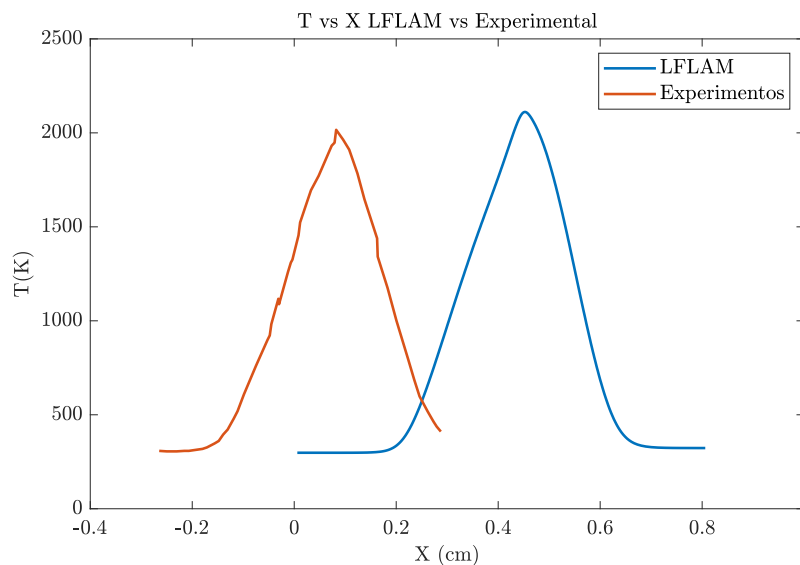


Figura 4.3: Comparativa perfil de temperatura en LFLAM vs experimental

Por mantener todos los datos como positivos, se desplazará en este caso la curva experimental. Tras diferentes ajustes, se ha llegado a la conclusión de que es necesario desplazarla **0.36 cm** hacia la derecha resultando en el perfil mostrado en la Figura 4.4. Del mismo modo, se asumirá este mismo desplazamiento para el resto de cálculos a 1 atmósfera y se repetirá el proceso completo para 4 y 8 atmósferas de presión.

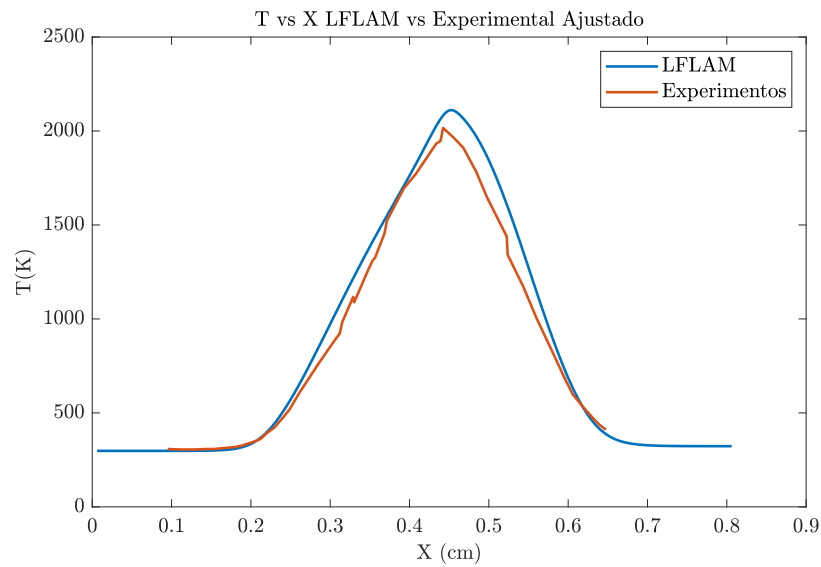


Figura 4.4: Comparativa perfil de temperatura en LFLAM vs experimental tras la corrección del desplazamiento espacial

Tomando este desfase, se pueden comparar las especies de las que se tiene registro tanto experimental como numérico, siendo estas el  $O_2$ , el  $CO_2$ , el  $C_2H_2$ , el  $H_2$  y el  $CH_4$ .

Ha sido necesario llevar a cabo exactamente el mismo procedimiento en el caso de la llama WRC15 [24], a pesar de que no existen datos experimentales de todas las especies para poder compararlo, sí que se ha podido calcular el desfase del cálculo numérico a través del perfil de temperatura.

## 4.2. Comparación de las predicciones de hollín con experimentos

### 4.2.1. Validación de la fase gas

Antes de proceder a validar los resultados de *soot* es necesario comprobar que todo el cálculo de la combustión es correcto y coherente, con el fin también de tener una buena estimación de aquellos elementos que serán precursores de hollín, a partir de los cuales se nuclearán estas partículas sólidas.

En la Figura 2.8 se puede apreciar la precisión del cálculo numérico de LFLAM. Dada la diferencia de orden de magnitud entre unas especies y otras se muestran en la Figura 4.6 estas agrupadas.

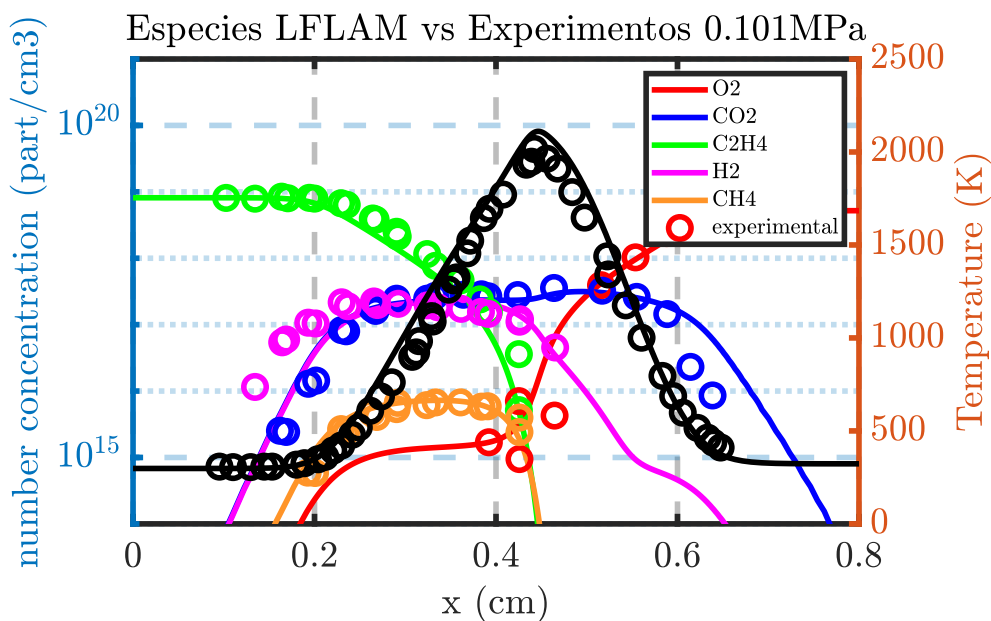
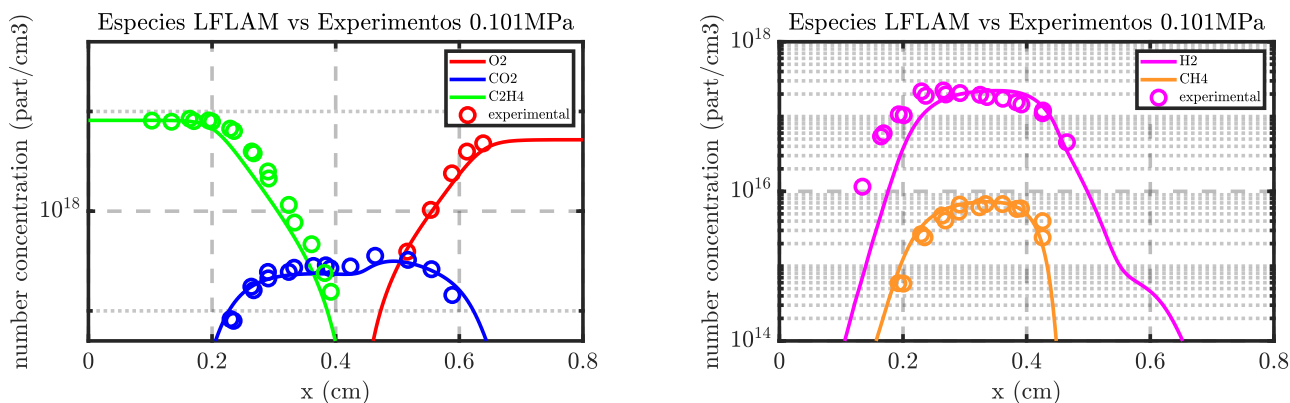


Figura 4.5: Comparativa especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.101MPa 2013K

Como bien se puede apreciar en las Figuras 4.5 y 4.6, las especies mayoritarias son reproducidas prácticamente a la perfección por LFLAM, incluido el perfil de temperatura a una presión de 1 atm.

Por otro lado, en la Figura 4.7 se presentan otras especies, menos presentes en la llama, pero existentes y fundamentales para la correcta predicción de hollín. Estas son algunas de las especies precursoras del hollín, los presentados como aromáticos. Cabe destacar que algunos de los submodelos previamente mencionados se basan en la nucleación de hollín por acetileno ( $C_2H_2$ ) y otros en la nucleación por  $A_4$  ( $C_{16}H_{10}$ ). Sin embargo, otros modelos de hollín tienen en cuenta la contribución de varios aromáticos. En definitiva, para poder realizar un correcto cálculo del hollín formado, es necesario predecir lo más preciso posible los precursores considerados en el modelo de *soot*.

En este caso, al considerarse acetileno y  $A_4$ , se presta especial atención a estas especies.



(a) Comparativa especies en LFLAM vs experimental 1 atm (1) (b) Comparativa especies en LFLAM vs experimental 1 atm (2)

Figura 4.6: Comparativa agrupada especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.101MPa 2013K

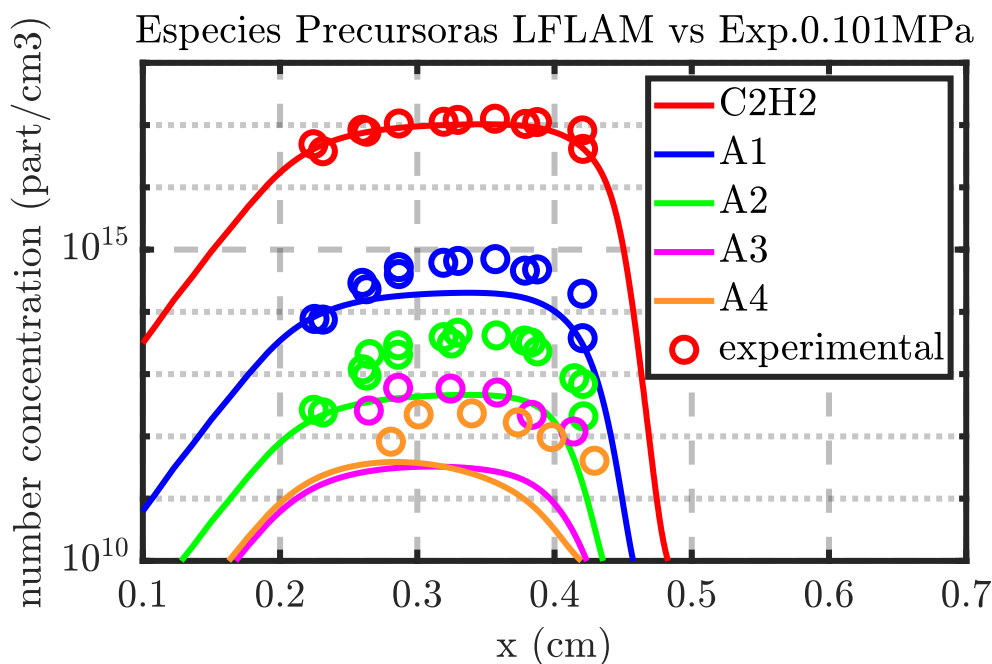


Figura 4.7: Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM vs experimental 0.101MPa 2013K

En la Figura 4.7 se puede apreciar la precisión en la reproducción del acetileno. Además, reproduce a la perfección la tendencia los distintos aromáticos, pero no su valor numérico, aunque sí que es muy aproximado.

Si se realiza este mismo cálculo sin considerar la hipótesis de  $Le=1$ , es decir, con difusión multi-componente, podemos observar lo siguiente:

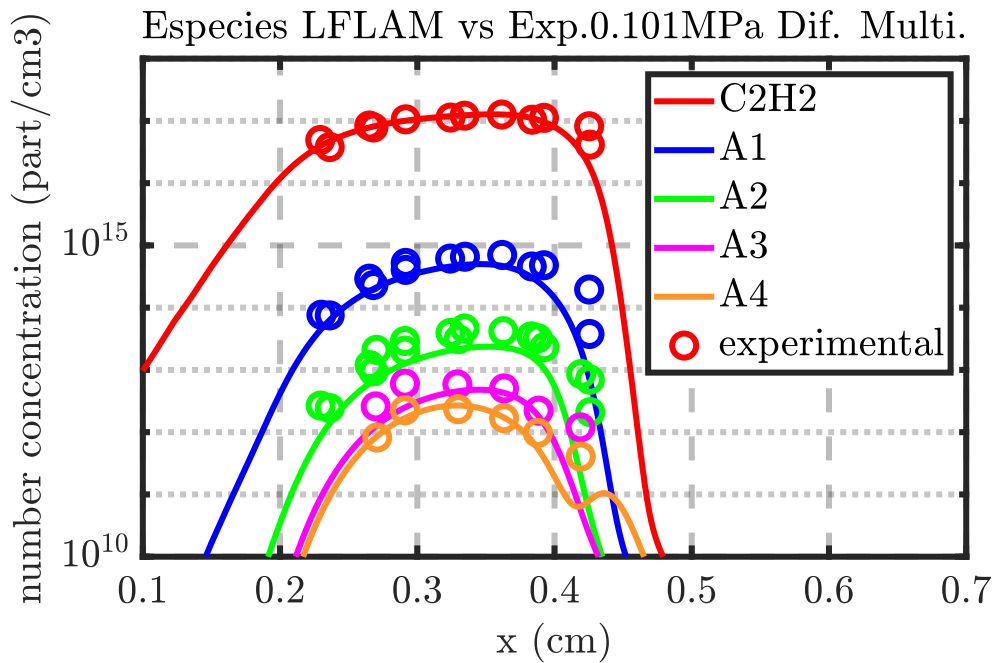


Figura 4.8: Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM con difusión multicomponente vs experimental 0.101MPa 2013K

Como se puede apreciar en la Figura 4.8, la predicción de especies precursoras asumiendo difusión multicomponente es bastante más acercada que al realizar la hipótesis de  $Le=1$ . También se puede ver que la hipótesis de  $Le=1$  es más cuestionable en algunas especies que en otras, siendo los aromáticos los más sensibles a difusión diferencial. Así, en el caso de emplear un submodelo basado en PAHs sería mucho más acertado realizar el cálculo de las *flamelets* con difusión multicomponente, mientras que si el submodelo está basado en nucleación por acetileno será totalmente correcta la asunción de  $Le=1$ .

Este procedimiento debe repetirse con los casos a  $0.405MPa$  y a  $0.811MPa$ .

Se obtienen por tanto los siguientes resultados a  $0.405MPa$ .

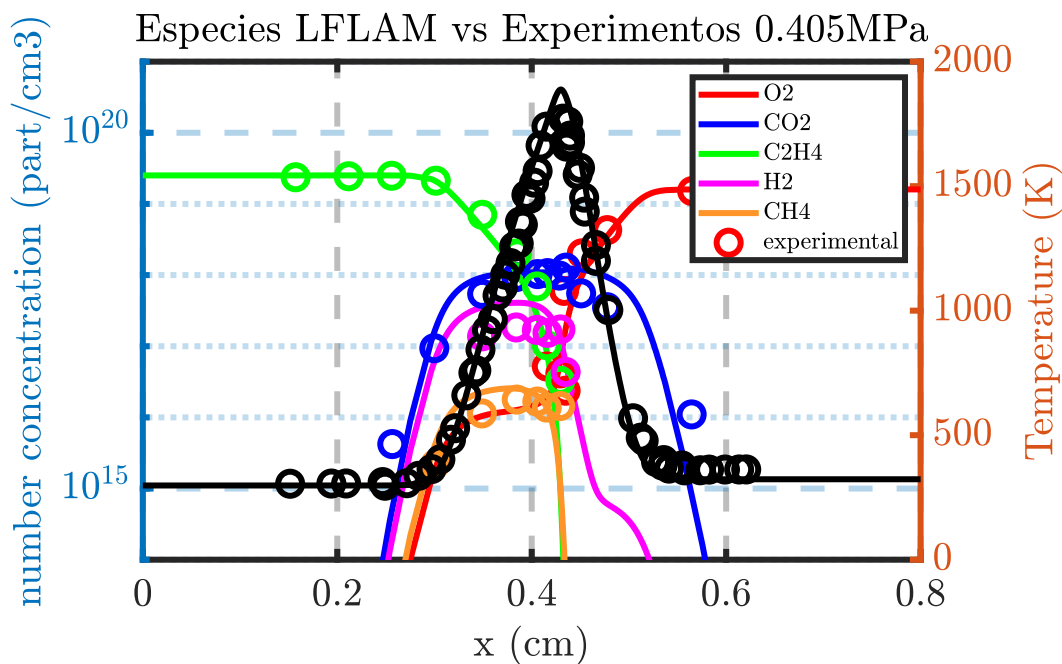
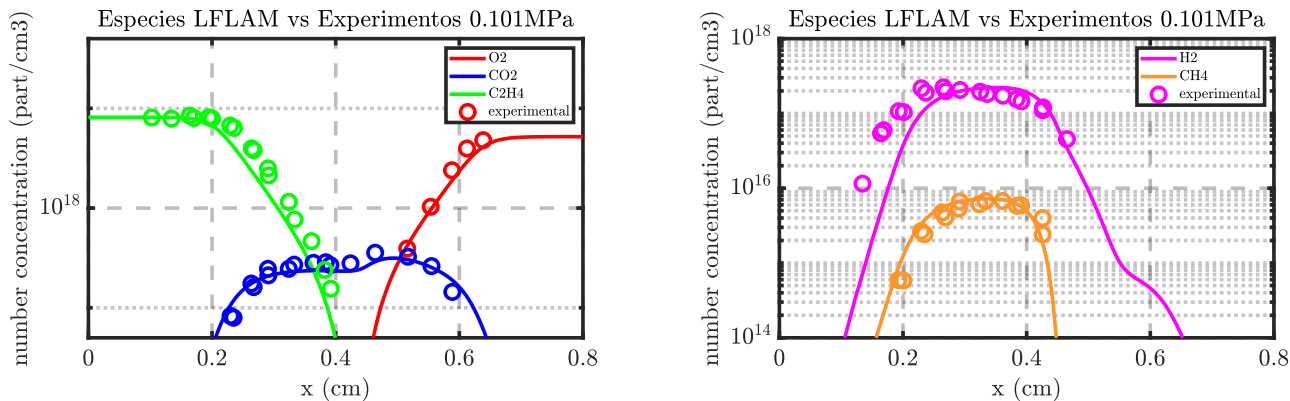


Figura 4.9: Comparativa especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.405MPa 1826K



(a) Comparativa especies en LFLAM vs experimental 4 atm (1) (b) Comparativa especies en LFLAM vs experimental 4 atm (2)

Figura 4.10: Comparativa agrupada especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.405MPa 1826K

De nuevo, apreciando las Figuras 4.9 y 4.10 se puede ver que se reproduce de forma casi perfecta todas las especies y el perfil de temperatura. Igual que en el caso de 1 atmósfera, la especie que más error presenta es el hidrógeno molecular.

Si se comparan también las especies minoritarias, precursoras de hollín, se puede observar la Figura 4.11.

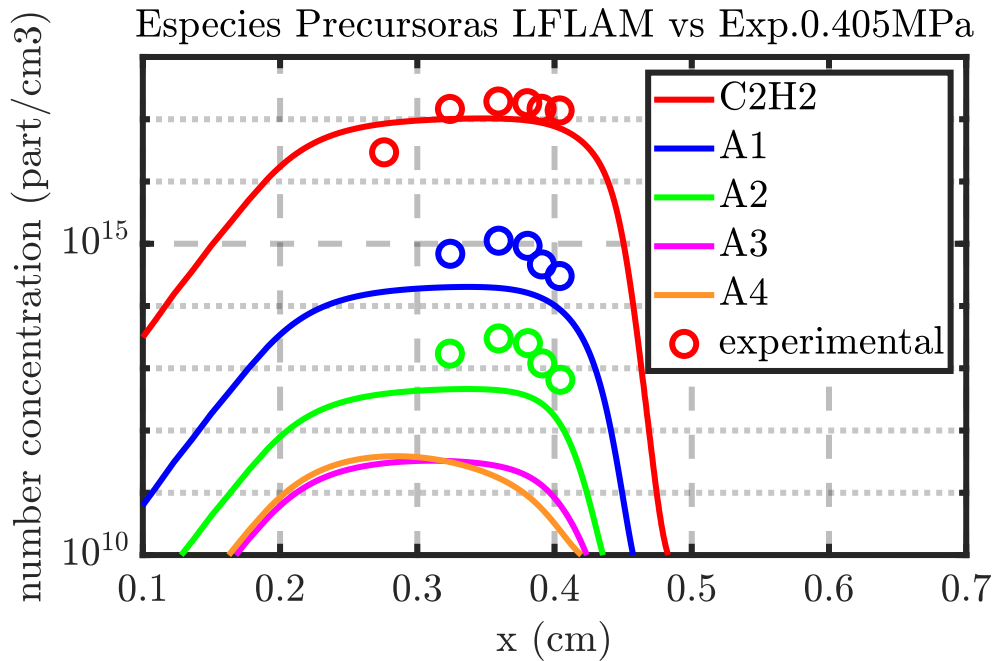


Figura 4.11: Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM vs experimental 0.405MPa 1826K

De nuevo, como en el caso de 1 atmósfera, se extraen las mismas conclusiones, la predicción más acertada es la de acetileno, pero aún así el cálculo numérico de los PAHs es muy aproximado, y lo sería más en caso de considerar difusión multicomponente en lugar de  $Le=1$ .

Se repite el proceso completo para los cálculos a 0.811 MPa:



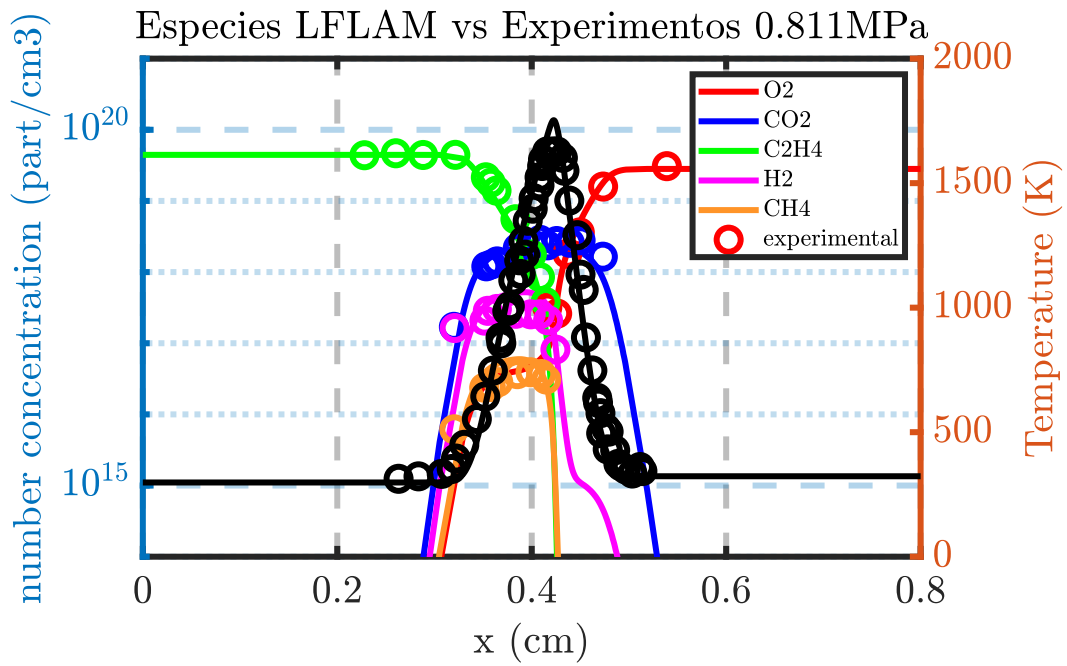
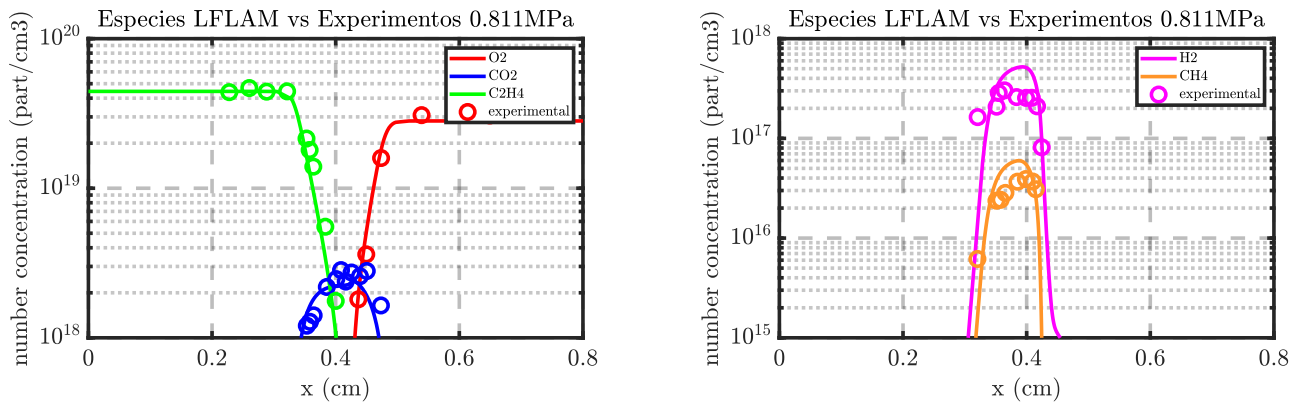


Figura 4.12: Comparativa especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.811MPa 1696K



(a) Comparativa especies en LFLAM vs experimental 8 atm (1) (b) Comparativa especies en LFLAM vs experimental 8 atm (2)

Figura 4.13: Comparativa agrupada especies mayoritarias en LFLAM vs experimental 0.811MPa 1696K

Si se comparan también las especies minoritarias, precursoras de hollín, se puede observar la Figura 4.14:

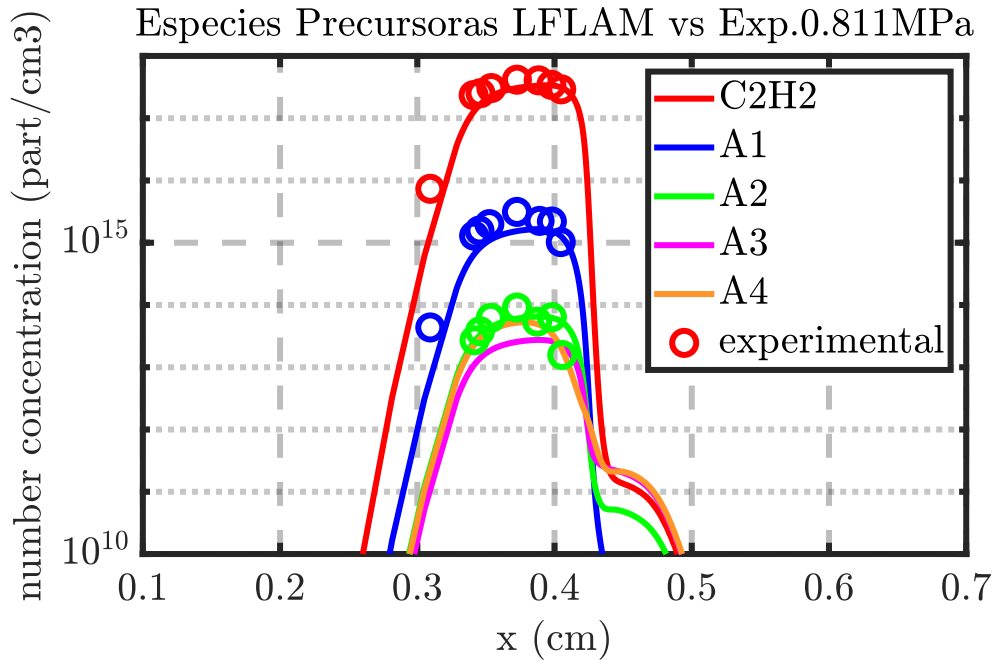


Figura 4.14: Comparativa especies minoritarias precursoras de hollín en LFLAM vs experimental 0.811MPa 1696K

En este caso, cabe destacar una diferencia importante respecto a los dos casos anteriores, ya que a 8 atmósferas asumiendo  $Le=1$  la predicción de los aromáticos precursores de hollín es bastante acertada, resultando innecesario un cálculo más costoso considerando difusión multicomponente para acercar la solución a los datos experimentales.

Por último, como se puede observar en las Figuras 4.5, 4.9 y 4.12, conforme aumenta la presión ambiente la llama queda reducida a un menor espacio físico, menor es el *Strain Rate* de esta. Además, en todos los casos se puede concluir que LFLAM reproduce de forma muy precisa la fase gas de las llamas.

#### 4.2.2. Validación de la predicción de hollín

A continuación, con las correcciones mencionadas en la sección anterior, se presentan los resultados de hollín, comparando cada uno de los submodelos con los resultados experimentales [37].

Para poder hacer esta comparativa ha sido necesario hacer un ajuste a las magnitudes con las que se postprocesará el caso, ya que LFLAM proporciona el valor de  $Y_S$ , mientras que en el artículo, Gleason grafica  $SVF$ , por lo que será necesario hacer uso de la Ecuación 3.4 para ajustar estos parámetros. Del

mismo modo, LFLAM calcula  $N_S$  en ( $part/g$ ), mientras que en el artículo se grafica como ( $part/cm^3$ ), por lo que será necesario multiplicar por la densidad y dividir entre 1000 para tener las mismas unidades.

Además, se presenta a continuación de nuevo la descripción de cada submodelo en lo que a constantes se refiere con el fin de poder hacer un análisis con comodidad.

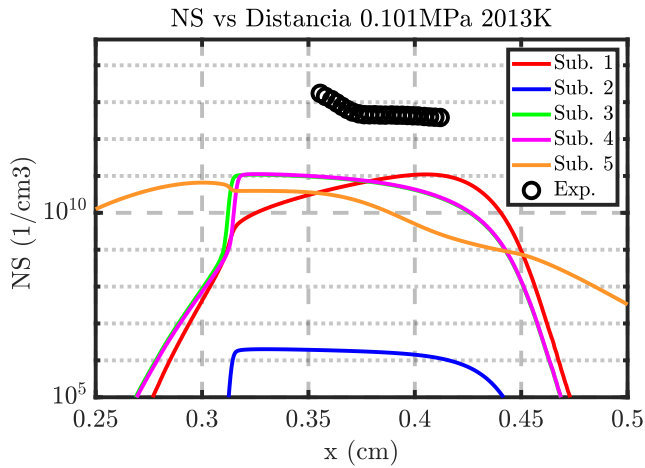
Constante (unidades de medida)	Submodelo 1 LLJ	Submodelo 2 FJL	Submodelo 3 LGSG	Submodelo 4 LGSG 2	Submodelo 5 LGSG A4
$A_{kn}$ (1/s)	10000	1350000	1000	1000	1000
$ER_{kn}$ (K)	21000	41000	16103	16103	16103
$A_{kg}$	$6 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^4$	$1,75 \cdot 10^4$	$7 \cdot 10^3$	$9 \cdot 10^4$
$ER_{kg}$ (K)	1210	24000	10064	10064	12100
$A_{kO_2}$ (cm/s)	$10^6$	$1,78 \cdot 10^6$	-	-	-
$ER_{kO_2}$ (K)	19680	39000	-	-	-
$A_{kOH}$ $\sqrt{K} \cdot g/(cm^2 \cdot s \cdot atm)$	-	-	127	10.57833	127*12
$A_{kO}$ $\sqrt{K} \cdot g/(cm^2 \cdot s \cdot atm)$	-	-	5.54	11.084955	0
$NC_{min}$ $ergs/(cm^2 \cdot s \cdot K^5)$	100	90000	700	700	100
$NC_{min}$ $ergs/(cm^2 \cdot s \cdot K^5)$	100	90000	700	700	100
$Ca$	9	3	0	0	9
$Cd$	0.55	0.55	0.55	0.5	0.55
$Crad$	$3,3337 \cdot 10^{-3}$	$3,3337 \cdot 10^{-3}$	$3,3337 \cdot 10^{-3}$	$4,243 \cdot 10^{-3}$	$4,243 \cdot 10^{-3}$
$\rho_s$	2	2	2	1.9	2

Tabla 4.3: Resumen constantes para los diferentes modelos de soot implementados en LFLAM (II)

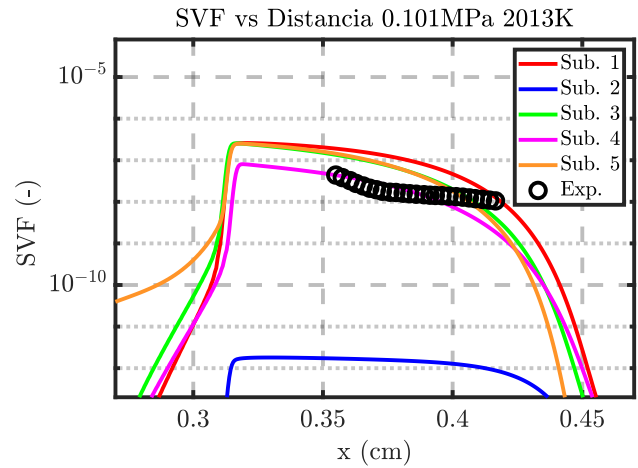
Tal y como se comentó previamente, de los casos de la Tabla 4.1 únicamente se tienen datos experimentales de hollín de aquellos resaltados. Se presentan a continuación los dos casos más extremos en cuanto a temperatura adiabática de llama se refiere para cada una de las condiciones de presión ensayadas.

### 4.2.3. Resultados llama Gleason

#### Resultados a 0.101MPa



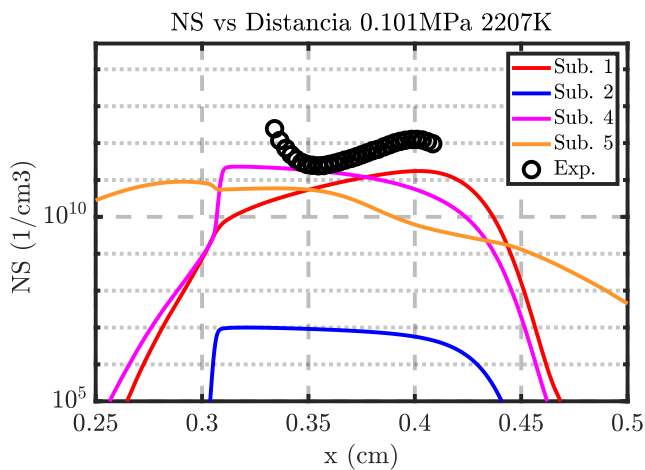
(a) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2013K



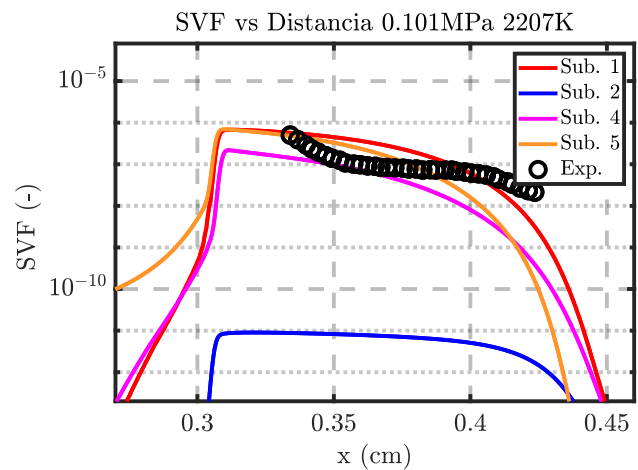
(b) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2013K

Figura 4.15: Resultados hollín 1 atm 2013K

Tras la realización de este primer cálculo, se pudo observar que el tiempo de cálculo del submodelo 3 triplicaba al de los demás submodelos, incluso llegando a no converger en muchos otros. Es por ello y, dada su gran similitud con el submodelo 4, observable en las Figuras 4.15a y 4.15b, se ha decidido descartar este submodelo desde un principio y no incluirlo en los posteriores cálculos y análisis.



(a) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2207K



(b) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2207K

Figura 4.16: Resultados hollín 1 atm 2207K

## Resultados a 0.405MPa

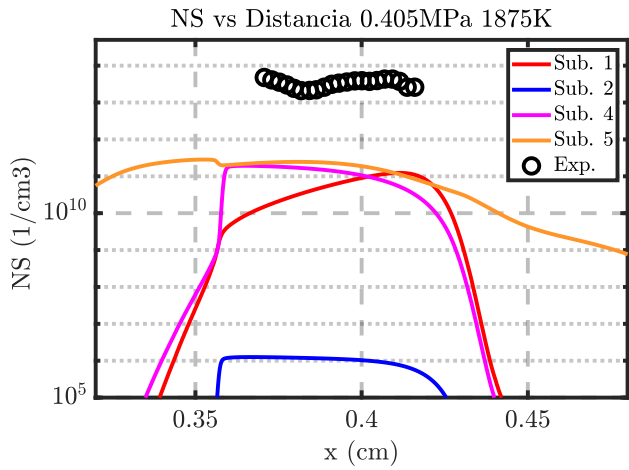
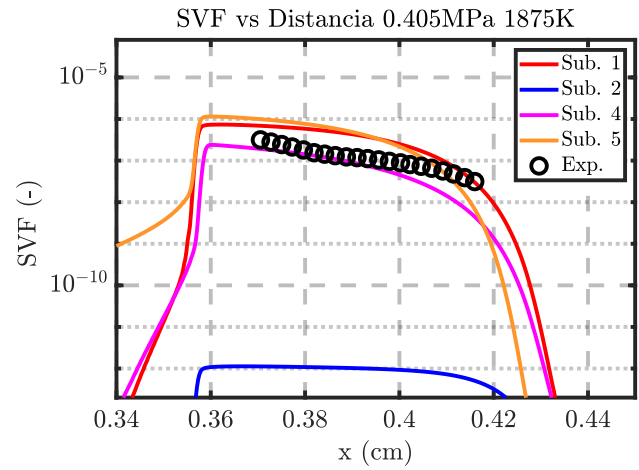
(a) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 1875K(b) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 1875K

Figura 4.17: Resultados hollín 4 atm 1875K

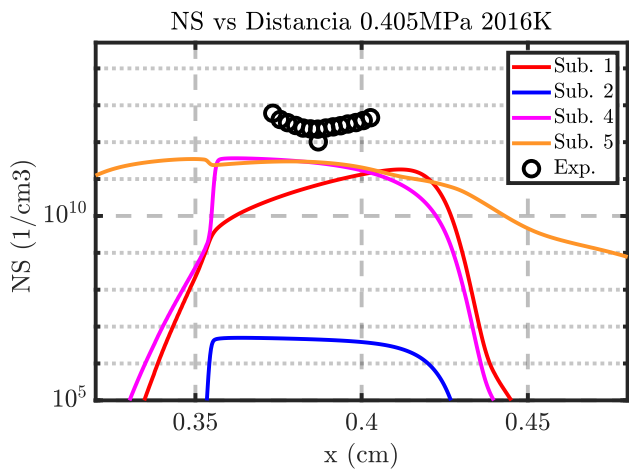
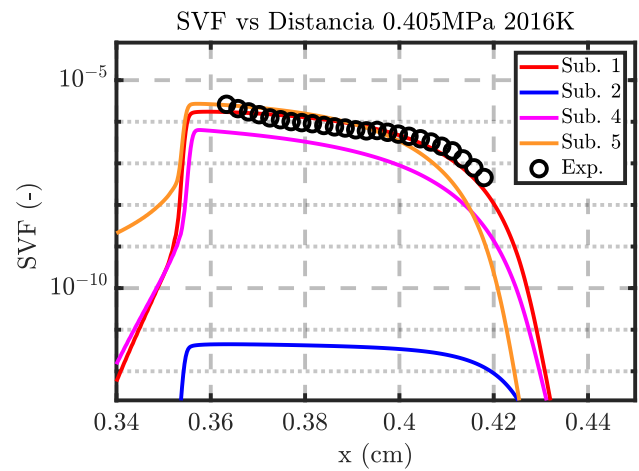
(a) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 2016K(b) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 2016K

Figura 4.18: Resultados hollín 4 atm 2016K

## Resultados a 0.811MPa

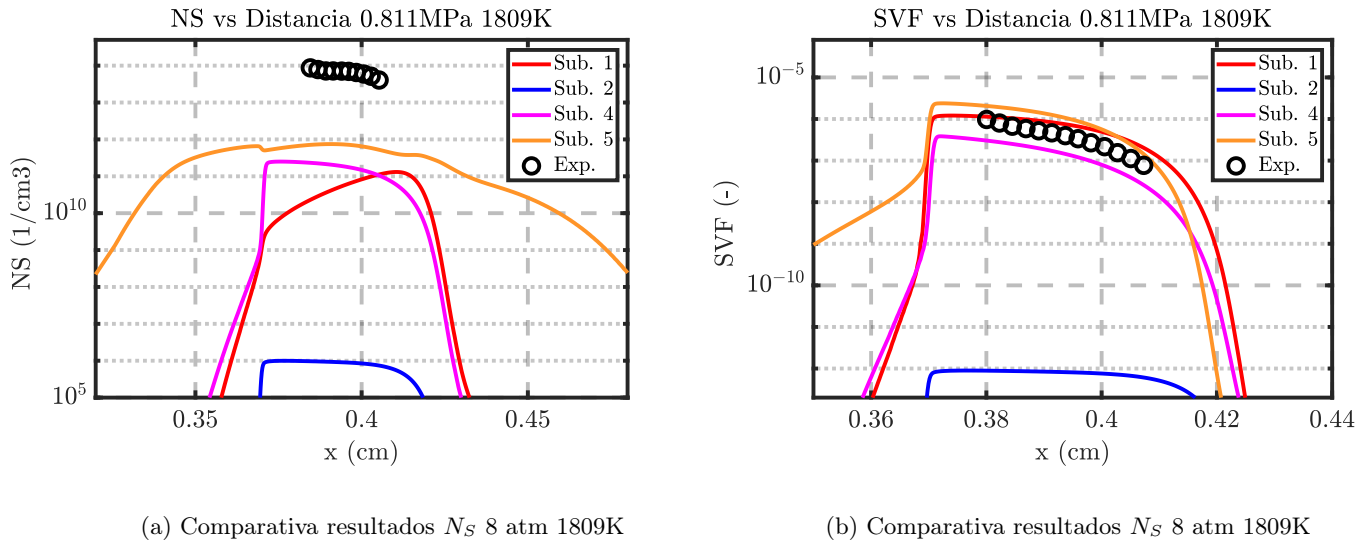


Figura 4.19: Resultados hollín 8 atm 1809K

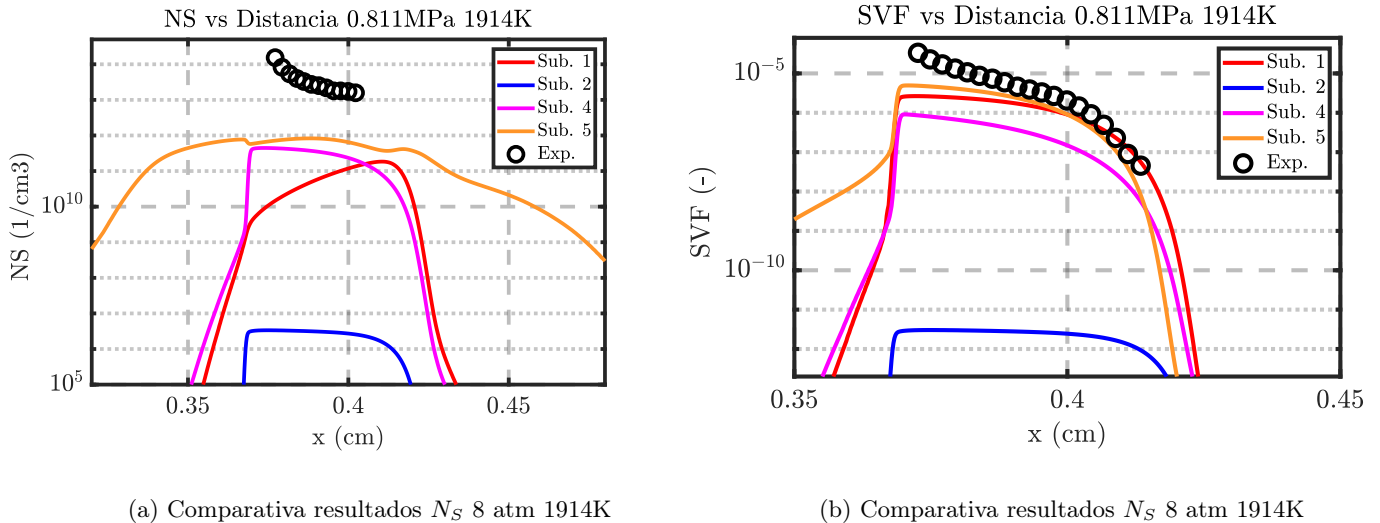


Figura 4.20: Resultados hollín 8 atm 1914K

## 4.2.4. Resultados llama WRC15

Se presentan a continuación los mismos resultados para el caso de la llama conocida como WRC15. En este caso, observando los resultados de la llama de Gleason, se aprecia la inviabilidad de las predicciones del Submodelo 2, que ha sido descartado del análisis de la llama WRC15 con el fin de centrar en análisis en aquellos que parecen simular mejor la formación de hollín.

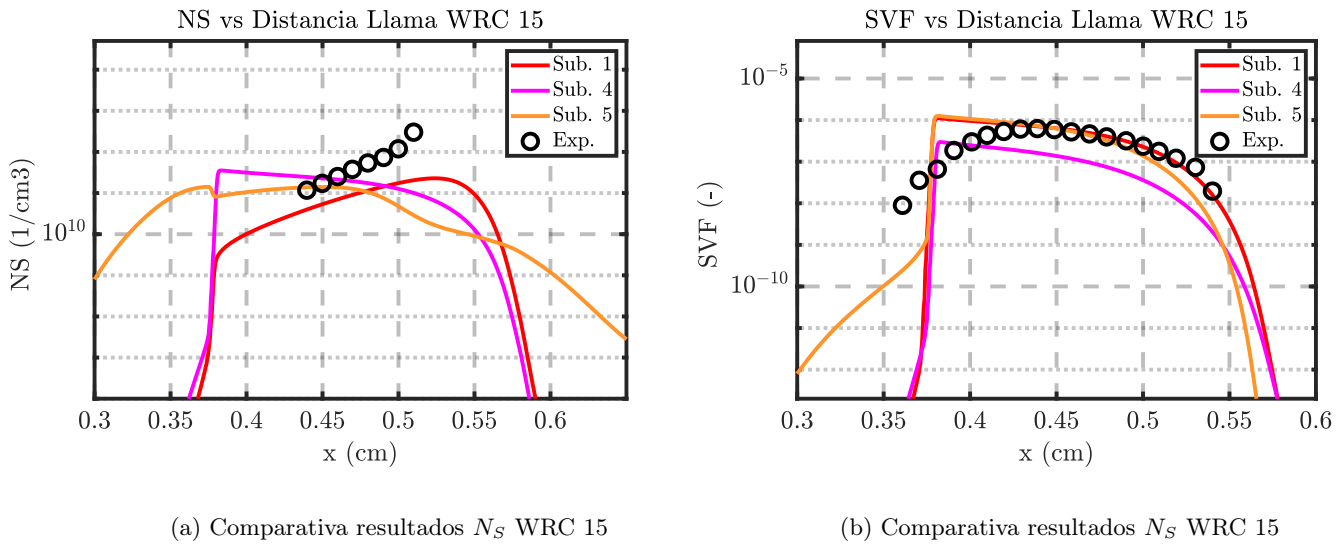


Figura 4.21: Resultados hollín llama WRC 15

De toda esta información, podemos extraer las siguientes conclusiones.

En primer lugar, respecto a los resultados encontrados a 1 atmósfera de presión en el caso de Gleason [37], se puede apreciar que la fracción volumétrica de hollín,  $SVF$  queda perfectamente representada por los resultados de LFLAM en el tramo del que se tienen resultados experimentales. Además, para este mismo parámetro se puede ver que la tendencia de todos los submodelos es la misma aunque no en el mismo orden de magnitud.

Sin embargo, se aprecia un resultado algo menos aproximado al representar el *soot Number Density*. Los submodelos no terminan de captar a la perfección la tendencia de los datos experimentales, por lo que resulta muy complicado extraer conclusiones. En el caso de la Figura 4.16a sí que se puede apreciar como el submodelo 1 reproduce de la mejor forma posible un tramo de la llama completa, consiguiendo una gran aproximación también al orden de magnitud de este parámetro, al igual que el resto de submodelos a excepción del submodelo 2.

Por otro lado, al analizar los resultados a 4 atmósferas de presión, se puede ver que se incrementa notablemente el orden de magnitud de los datos experimentales de  $N_S$  en todos los casos presentados, sin embargo, este incremento no ocurre en el resultado numérico de LFLAM. Así, el error cometido con la predicción del valor de este parámetro aumenta al haber aumentado la presión, pero la tendencia de los resultados sigue siendo bien captada principalmente por el submodelo 1 y el submodelo 5. Respecto al  $SVF$ , los resultados obtenidos son buenos, tanto en tendencia como en valor por casi todos los submodelos, excepto el 2 de nuevo, destacando el perfecto ajuste del submodelo 1 en la Figura 4.18b.

Se puede apreciar como en aquellos casos en los que la temperatura de combustión es mayor, la

representación de FLAM parece más ajustada a la realidad.

Si se analizan a continuación los resultados a 8 atmósferas de presión, se pueden confirmar las conclusiones extraídas previamente. Por un lado, se sigue prediciendo tanto la magnitud como la tendencia del  $SVF$ , mientras que la del  $N_S$  empeora conforme se ha aumentado la presión, ya que aumenta el valor de los datos experimentales que se tienen.

Por último, al darse las condiciones que aumentan la temperatura adiabática de llama el modelo de hollín se aproxima mejor en su totalidad a los datos experimentales.

En general, los diferentes submodelos de hollín, están pensados y contrastados principalmente para casos atmosféricos, por lo que no resulta extraña la desviación del resultado teórico del experimental a altas presiones. Además, esta desviación se da principalmente en la magnitud  $N_S$ , lo cual era esperable.  $N_S$  tiene un orden de magnitud muy elevado, lo cual hace que resulte mucho más complicado de resolver numéricamente, y puede estar ocurriendo un problema de resolución numérica. Para tratar de mitigar esto se ha implementado en LFLAM la resolución de la ecuación de transporte de  $N_S$  de forma adimensional, dividiendo entre un factor conocido como  $N_{Scale}$  para poder tratar con números notablemente menores. A pesar de ello, al realizar el cálculo con LFLAM, el residual que queda siempre más elevado una vez avanzado el cálculo es siempre el de  $N_S$ , lo cual indica la difícil convergencia aún así de esa ecuación de transporte. Además, dividir entre este factor provoca la necesidad de multiplicar por este para extraer el valor de  $N_S$  en LFLAM, multiplicando por tanto el error que pudiera tener la resolución de la ecuación.

Por último, en general los errores en ambas magnitudes se pueden deber a no haber considerado todos los efectos que modifican realmente el número y estructura de las partículas de hollín e incluso a haberlo hecho de una forma aproximada. Es posible que falten subprocesos por considerar, como la división de partículas, la nucleación por otros aromáticos u otras oxidaciones.



### 4.3. Selección del submodelo más preciso y representativo

En primer lugar, cabe destacar que la selección del submodelo más preciso no se ha llevado a cabo únicamente teniendo en cuenta la perfecta reproducibilidad de los experimentos, sino también la dificultad de convergencia y el tiempo de cálculo.

Es por ello que, tal y como se ha comentado en la sección anterior, el submodelo 3 ha sido descartado desde un primer momento. El submodelo 4 resultaba ser una variación de este, por lo que sus resultados son muy similares, sin embargo el tiempo de cálculo con el submodelo 3 triplica un cálculo con cualquier otro submodelo. Estos hechos en conjunto hacen que el descarte del submodelo 3 sea directo.

Por otro lado, mientras que los submodelos 1,4 y 5 se diferencian en la tendencia de la representación en el conjunto del dominio, pero mantienen todos el mismo orden de magnitud en la parte central donde se concentra la reacción, el submodelo 2 dista de todos estos. Este submodelo está siempre 5-7 órdenes de magnitud por debajo del resto de modelos, tanto en  $N_S$  como en  $SVF$ . Esto indica claramente que no es adecuado, ya que, en consecuencia, sus resultados están siempre 5-7 órdenes de magnitud por debajo de los experimentales. Respecto a la tendencia de este submodelo, es prácticamente la misma que los submodelos 3 y 4, por lo que no representa ninguna tendencia que resulte de interés mantener.

Tanto el submodelo 1 como el submodelo 4 tienen en cuenta la nucleación con acetileno, a pesar de que hacen uso de constantes diferentes. Si observamos principalmente las Figuras 4.16 y 4.21a podemos ver que el submodelo 1 es el que mejor predice la tendencia de la formación de hollín, siendo casi exacto en la representación del  $SVF$ . Es por ello que se descarta el submodelo 4.

Finalmente, el caso del submodelo 5 es algo particular, ya que es el único que considera el  $A_4$  como precursor del hollín, necesario para la nucleación. Por ese motivo se le ha prestado más atención en este análisis llegando a la conclusión de que este submodelo reproduce aceptablemente bien las tendencias de las partículas de las partículas, pero resulta parecer desplazado en el espacio. Además, este submodelo estima que hay una mayor existencia de partícula de hollín en un rango mayor al resto de submodelos, considerando que su existencia se extiende más allá de la propia posición de la llama, tal y como se puede apreciar en las Figuras 4.15a o 4.17a. No se tienen datos experimentales de esa zona, únicamente de la región en la que se encuentra la llama, por lo que no se pueden extraer conclusiones determinantes de qué submodelo está reproduciendo con mayor exactitud los resultados alejados del frente de llama.

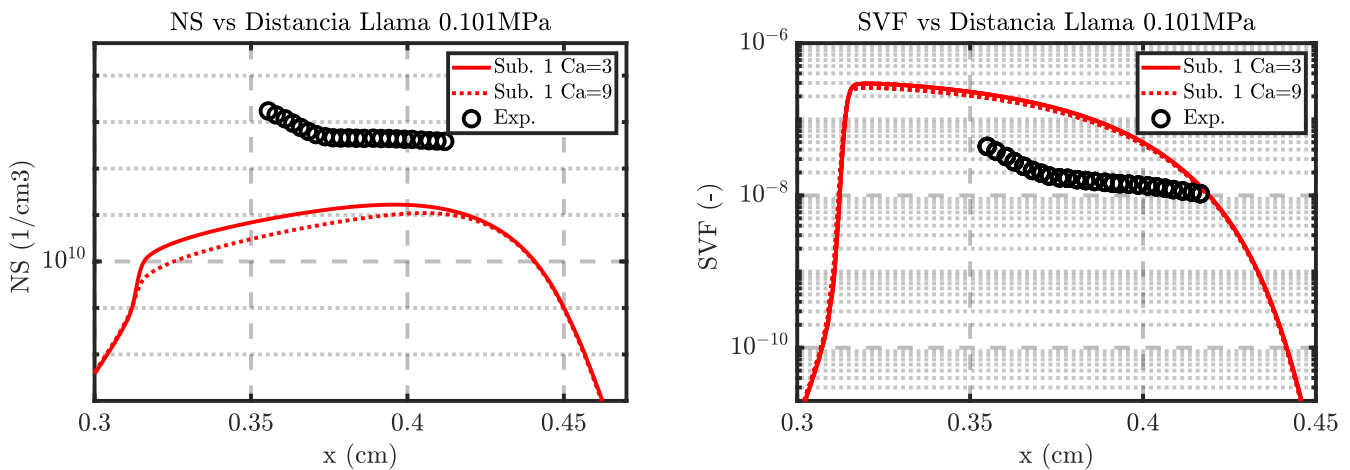
En general, se puede afirmar que los dos submodelos que resultan más representativos de la formación de hollín son el submodelo 1 y el 5, siendo su diferencia más clara el hidrocarburo considerado para la nucleación del *soot*, acetileno y  $A_4$  respectivamente. Sin embargo, parece que el submodelo 1 capta mejor la tendencia general del  $SVF$  de los diferentes casos y el  $N_S$  principalmente a bajas

presiones. A pesar de ello, sí que se puede ver que la predicción de  $SVF$  es totalmente representativa de la realidad, pero los valores de  $N_S$  quedan infrapredichos. Por ello, se propone una ligera modificación de el submodelo 1 para tratar de aproximar los resultados todavía más a la realidad.

### 4.3.1. Estudio de sensibilidad de los resultados

Dada la discrepancia en el valor de  $N_S$ , se ha realizado un estudio de sensibilidad de esta variable. El parámetro que se ha decidido modificar para ello es la constante de aglomeración, ya que esta provoca que, por ejemplo, dos partículas se unan en una y se espera que cambie radicalmente el ( $N_S$ ). El valor de esta constante era inicialmente de 9. Si se observa la Tabla 4.3 se puede ver que, comparando con el resto de submodelos, se trata de un valor notablemente alto. Si se disminuye este valor, se estaría considerando que menos partículas se aglomeran para formar partículas más grande. Esto aumentaría considerablemente el número de partículas de hollín, el  $N_S$ , sin alterar directamente la fracción volumétrica de hollín. Por ello, se ha rebajado el valor hasta 3, siendo este el siguiente empleado en otros submodelos contrastados.

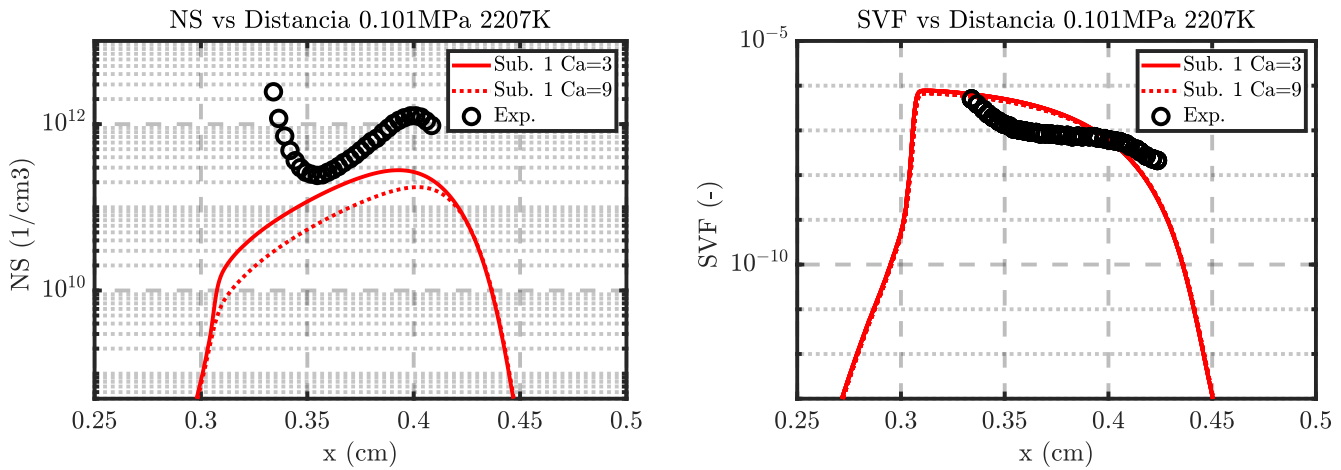
Se ha decidido contrastar este cambio y analizar los dos casos de los que se tienen datos experimentales a 1 atmósfera, ya que el caso final a representar, tal y como se explicará en el próximo capítulo será a presión atmosférica.



(a) Comparativa modificación sub. 1  $N_S$  1 atm. 2013K

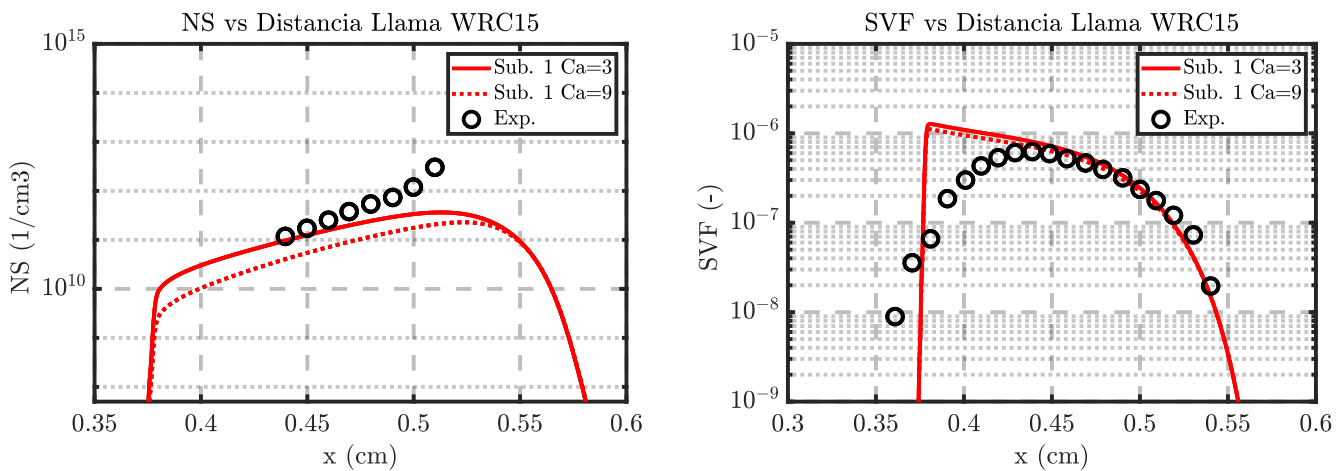
(b) Comparativa modificación sub. 1 SVF 1 atm. 2013K

Figura 4.22: Resultados modificación sub.1 1 atm. 2013K

(a) Comparativa modificación sub. 1  $N_S$  1 atm. 2207K

(b) Comparativa modificación sub. 1 SVF 1 atm. 2207K

Figura 4.23: Resultados modificación sub.1 1 atm. 2207K

(a) Comparativa modificación sub. 1  $N_S$  WRC15

(b) Comparativa modificación sub. 1 SVF WRC15

Figura 4.24: Resultados modificación sub.1 WRC15

Tal y como se puede apreciar en las Figuras 4.22a, 4.23a y 4.24a, se ha producido una variación del valor de  $N_S$  en la dirección predicha previamente, aumentando y acercándose más a los datos experimentales. Sin embargo, esta diferencia es notablemente menor a la esperada al dividir entre 3 la constante de aglomeración, ( $C_a$ ) lo cual supone una variación significativa. Así, demuestra que modificar el factor de aglomeración induce un cambio en la formación del hollín, pero no muy representativo, los resultados no son muy sensibles a la constante de aglomeración. Además, sí que hay una pequeña variación en  $SVF$  ya que el factor de aglomeración no afecta directamente a este parámetro, pero sí que influye en el proceso de formación de hollín y afecta a otras etapas, como la oxidación, que sí que

influyen en el  $SVF$ .

Teniendo en cuenta todos los resultados anteriores, se ha considerado que el submodelo 1 original será el empleado en el cálculo de los casos con LFLAM para realizar la tabulación dada su casi perfecta representación del  $SVF$  y la gran aproximación que hace de la tendencia de  $N_S$  a bajas presiones, ya que el caso CFD a calcular y representar será a esta presión.

Finalmente se ha decidido hacer uso del submodelo de la literatura que diera resultados más satisfactorios en las llamas estudiadas. La modificación de la constante de aglomeración es una de las formas de modificar el modelo con el fin de ajustarlo al máximo posible a los resultados experimentales. Sin embargo, para realizar correctamente estas modificaciones sería necesario hacer un estudio paramétrico exhaustivo, que no entra dentro del objetivo del trabajo, ya que cualquier modificación del modelo sin criterio podría llevar a una gran dificultad de convergencia de los casos y, por tanto, un mayor coste computacional. Además, la diferencia que supone en los casos analizados en las Figuras 4.22, 4.23 y 4.24 no es significativa.

Al hacer uso de este submodelo se debe ser consciente de sus limitaciones, principalmente respecto al valor de  $N_S$ .

## Capítulo 5

# Tabulación e integración en el software CFD Alya

El capítulo 5 de este trabajo se centra en la tabulación y la integración del modelo de predicción de hollín en el software CFD Alya. El objetivo principal es obtener una implementación práctica y eficiente del modelo, permitiendo su aplicación en el análisis de condiciones reales de combustión en quemadores de turbinas de gas. Esta sección describe los pasos que se seguirán para llevar a cabo la tabulación del estado termoquímico y la integración del modelo en el software Alya, lo que nos permitirá realizar simulaciones numéricas de sistemas de combustión con mayor precisión y detalle.

El proceso de tabulación del estado termoquímico implica generar tablas de datos termoquímicos relevantes, como la temperatura, la densidad de la mezcla y las fracciones molares de especies químicas, así como aquellos datos, principalmente términos fuente, requeridos para poder calcular el hollín y continuar las iteraciones. Tal y como muestra la Figura 3.1, los datos termoquímicos son utilizados en el software CFD durante el cálculo, interpolando en las tablas a partir de la fracción de mezcla ( $Z$ ) y la variable de progreso normalizada ( $C$ ).

En el punto de partida de este trabajo, Alya era capaz de utilizar la tabulación para resolver la termoquímica de la combustión. Con el objetivo de resolver la formación de hollín mediante el método de dos ecuaciones se han llevado a cabo las modificaciones necesarias en el código. El objetivo es lograr una interfaz fluida y coherente entre los diferentes modelos, asegurando un análisis integral de la formación de hollín en los sistemas de combustión estudiados.

Tras implementar el modelo en Alya, se realizará una primera evaluación del mismo, comparando los resultados de un cálculo laminar con el software XLFLAM con el correspondiente Alya. Este es el primer paso en la validación para asegurar que el software CFD reproduce adecuadamente todos los procesos modelados en un caso más sencillo 1D. Este análisis permitirá evaluar la precisión y validez de la implementación, así como identificar posibles limitaciones y áreas de mejora. A partir de ahí se

espera utilizar el modelo en casos más complejos 3D turbulentos, más cercanos a la aplicación real y donde se pueda validar con resultados experimentales.

## 5.1. Proceso de tabulación del estado termoquímico

### 5.1.1. Estructura de las tablas

En primer lugar, cabe presentar los cinco archivos o tablas diferentes que deben ser creados para que el software CFD Alya pueda realizar correctamente un cálculo. Los cinco archivos ya eran utilizados en una simulación sin soot, y únicamente en el caso de los dos últimos ha habido que añadir las variables necesarias para el método de dos ecuaciones.

- El primero tendrá el nombre de **PROP**, *properties table*. En esta se incluirán todas las propiedades del fluido, tales como la conductividad, viscosidad, peso molecular o calor específico. Todas estas serán tabuladas, tal y como se ha expuesto previamente, respecto a  $Z$  y  $C$ . En concreto, las variables a mostrar en esta tabla son las mostradas en la Figura 5.1:

ZMEAN	CMEAN	W	k	mu	CP1_1	CP1_2	CP1_3	CP1_4	CP1_5	CP1_6	CP2_1	CP2_2	CP2_3	CP2_4	CP2_5	CP2_6
-------	-------	---	---	----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Figura 5.1: Tabla laminar de propiedades para Alya

En la Figura 5.1 se puede ver la estructura de lo que sería una tabla laminar, donde no hay interacción entre la turbulencia y la combustión. Si el caso a calcular fuera turbulento por cualquier motivo, la figura sería igual pero estaría parametrizada en  $Z_{mean}$ ,  $Z_{var}$ ,  $C_{mean}$  y  $C_{var}$ . Estas varianzas reflejaran la dispersión de las variables a causa de la turbulencia.

- El segundo documento a generar por otra parte se llama **SCALE**, o *scaling table*. Esta tabla estará únicamente parametrizada en  $Z$  (y  $Z_{var}$  si se trata de un caso turbulento) debido a que en ella se contienen todos valores relacionados con la variable de progreso, su valor máximo, mínimo y otros valores que Alya requiere para hacer el cálculo, en concreto las mostradas en la Figura 5.2.

ZMEAN	Ycmax	Ycmin	Ycmax2	Ycmin2	Ycminmax
-------	-------	-------	--------	--------	----------

Figura 5.2: Tabla laminar de escalado para Alya

Los parámetros que cuentan con un 2 al final hacen referencia al cuadrado del parámetro en sí, e  $Y_{cminmax} = Y_{c,min} \cdot Y_{c,max}$ . Estos dos valores, presentados con anterioridad en la Ecuación 3.30, son cruciales para el cálculo de la variable de progreso normalizada ( $C$ ) respecto del valor de la misma resuelto en la ecuación de transporte ( $Y_C$ ).

El contenido de las dos tablas restantes depende de si se emplea el modelo de soot o si no. La primera integración que se hará en el presente trabajo será sin soot, con el fin de comprobar que el *software* CFD reproduce a la perfección las llamas de LFLAM.

- La tabla **SRC**, o *source*, dependiendo de si se hace uso del modelo de hollín o no, incluye los términos fuente necesarios para la resolución numérica de las diferentes ecuaciones de transporte, tanto de las variables de parametrización como del propio hollín. En la Figura 5.3 se presenta la tabla laminar *source* para tabulaciones sin tener en cuenta el modelo de hollín, mientras que en la Figura 5.4 se muestra la misma tabla laminar teniendo en cuenta este modelo.

ZMEAN CMEAN omegaYc

Figura 5.3: Tabla laminar de términos fuente para Alya

ZMEAN CMEAN omegaYc Qnuc Qsg\_As Qox\_As

Figura 5.4: Tabla laminar de términos fuente con *soot* para Alya

Como se puede apreciar, en ambas Figuras, 5.3 y 5.4, en esta tabla se incluye el término fuente de  $Y_C$ . En el caso de la tabla con hollín se incluyen las tasas de reacción que constituyen el término fuente tanto de  $N_S$  como de  $Y_S$ , tal y como se explicó en la presentación del modelo de hollín en LFLAM.

- Por último, la tabla **SPEC**, o especies correspondiente se muestra en la Figura 5.5.

ZMEAN CMEAN OH CO C2H4 CH2O H2O A4 C2H2 N2 O2 CO2

Figura 5.5: Tabla laminar de especies para Alya

De nuevo, si se trata de una tabla turbulenta, se añadirán las columnas de la varianza y media de C y Z. Además, todas las especies mostradas dependen plenamente de las especies indicadas para el análisis en el archivo de *input*, concretamente en la sección para ello de la Figura 3.8.

Por otro lado, si se realiza un cálculo con *soot*, en la tabla se añadirían  $SVF$ ,  $N_S$  e  $Y_S$ . Cabe destacar que estos se han incluido para poder analizar la diferencia de transportar realmente  $N_S$  y  $Y_S$  y obtenerlo de las tablas precalculadas. Además, es necesario añadir que esta tabla no es fundamental para el cálculo, pero sí, como se ha dicho, de interés para el postprocesado.

Por último, cabe destacar que las diferentes columnas de las variables presentadas no es lo único que necesita leer el software CFD para poder tomar esas tablas para realizar el cálculo. Todos los archivos siguen la misma estructura, mostrada en la Figura 5.6.

```

$*****$
$ Source table for alya (Laminar) $
$*****$

N_VALUES: 101, 101
N_VARI: 1
N_CHUNK: 100

ZMEAN SUBDIVISION:
0.00000000e+00 1.00000000e-03 2.82842712e-03 5.19615242e-03 8.00000000e-03 1.11803
3.64828727e-02 4.15692194e-02 4.68721666e-02 5.23832034e-02 5.80947502e-02
1.03189147e-01 1.10304125e-01 1.17575508e-01 1.25000000e-01 1.32574507e-01
1.89570567e-01 1.98252364e-01 2.07062792e-01 2.16000000e-01 2.25062214e-01
2.91862982e-01 3.01869177e-01 3.11987179e-01 3.22215766e-01 3.32553755e-01
4.07890917e-01 4.19065627e-01 4.30340563e-01 4.41714840e-01 4.53187599e-01
5.36186535e-01 5.48418636e-01 5.60742365e-01 5.73157047e-01 5.85662019e-01
6.75672258e-01 6.88877348e-01 7.02167359e-01 7.15541753e-01 7.29000000e-01
8.25513174e-01 8.39624321e-01 8.53814968e-01 8.68084673e-01 8.82433000e-01
9.85037563e-01 1.00000000e+00

CMEAN SUBDIVISION:
0.00000000e+00 1.49624373e-02 2.98494962e-02 4.46607932e-02 5.93959388e-02 7.40545
1.60375679e-01 1.74486826e-01 1.88518022e-01 2.02468809e-01 2.16338721e-01
3.11122652e-01 3.24327742e-01 3.37447361e-01 3.50480947e-01 3.63427930e-01
4.51581364e-01 4.63813465e-01 4.75953246e-01 4.88000000e-01 4.99953002e-01
5.80934373e-01 5.92109083e-01 6.03182662e-01 6.14154176e-01 6.25022667e-01
6.98130823e-01 7.08137018e-01 7.18030143e-01 7.27808891e-01 7.37471906e-01
8.01747636e-01 8.10429433e-01 8.18980664e-01 8.27399305e-01 8.35683233e-01
8.89695875e-01 8.96810853e-01 9.03765910e-01 9.10557281e-01 9.17180920e-01
9.58430781e-01 9.63517127e-01 9.68377223e-01 9.73000000e-01 9.77372583e-01
9.99000000e-01 1.00000000e+00

```

Figura 5.6: Inicio común archivos tabulación

Se deben destacar varias partes del archivo mostrado en la Figura 5.6. Antes de nada, recalcar que el ejemplo mostrado corresponde a una tabla *source* laminar sin *soot*.

- En la primera línea "**N\_ VALUES**" se muestra la discretización hecha para todas las variables empleadas para parametrizar. En ese caso, se utilizan Z y C, y ambas discretizadas de 0 a 1 en 101 puntos. Esto es lo que indica la primera línea, que tendrá tantos elementos separados por comas como variables se empleen para parametrizar.
- En la segunda línea "**N\_ VARI**" hace referencia al número de variables, a parte de las de parametrización incluye el archivo. Este número depende tanto del archivo de tabulación en el que se esté dando, como de si se está tabulando con o sin el modelo de hollín.
- La tercera línea, "**N\_ CHUNK**" expone el número de caracteres que conforman, como má-



ximo una línea en el documento, para así hacerle saber a Alya si está leyendo una línea, que corresponde con un valor de C y Z o está en la siguiente ya. Lo importante es que este valor sea lo suficientemente elevado como para que no haya ningún tipo de problema en la lectura y se provoque el paso a la siguiente línea para lectura sin haber acabado realmente la primera.

- Por último, tras estas tres indicaciones aparecen "**ZMEAN SUBDIVISION** y **CMEAN SUBDIVISION**". En estas secciones se debe indicar la parametrización de las variables empleadas, pudiéndose escribir tantas como elementos se hayan puesto en "**N\_VALUES**".

Todos los números, tanto en la indicación de la parametrización, como en las propias columnas de las tablas tienen que tener el mismo formato, X.XXXXXXXXXXe-XX, para que Alya no tenga problemas de interpretación.

### 5.1.2. Estrategia de tabulación de *flamelets* de difusión

Una vez explicado el resultado total de la tabulación, se muestra en el Anexo G el *script* creado durante la realización del presente trabajo para hacer la tabulación de casos laminares más automática posible. Este *script* genera los cuatro archivos necesarios a partir una estructura *.mat*.

Esta estructura *.mat* contendrá todos los casos calculados de la rama *Upper* hasta el punto de extinción, es decir, partirá del *Strain Rate* más bajo calculable, hasta el *Strain* de extinción, tal y como se explicó en el Capítulo 4.

En este propio cálculo, se incluye la variable  $Z_{bilger}$ . Sin embargo, esta definición de Z no es única para cada punto del dominio, por lo que se ha creado un vector z, definido de 0 a 1 con 101 puntos únicos refinando en la zona de menores z, donde se encuentra el estequiométrico. Tras ello se han interpolado todos los resultados existentes respecto a esta nueva definición de z, que será la empleada en la parametrización final.

Por otro lado, es necesario parametrizar los resultados en C, definida por la Ecuación 3.30. Se crea en primer lugar un vector C, que se definirá igual que el vector z, pero refinando en la zona de mayores valores de C, donde se encontrarán los mayores gradientes.

Para encontrar entonces a que C hace referencia cada *Strain Rate*, que es la variable en la que se tienen parametrizados en ese momento los casos, es necesario definir  $Y_{C,min}$  e  $Y_{C,max}$ .  $Y_{C,min}$  será definida como una matriz de ceros con tantas filas como valores tiene C.  $Y_{C,max}$  será la curva de  $Y_C$  del menor *Strain* calculado, idealmente el SR=1. Esto se debe a que la curva de la variable de progreso se ha elegido de forma que sea completamente monótona decreciente al aumentar el *Strain Rate*, por lo que el valor más alto posible de  $Y_C$  se dará siempre al SR más pequeño calculado.

Por tanto, teniendo en cuenta que existe un valor de  $Y_C$  para cada Z y cada SR se procederá de la siguiente manera. En primer lugar, se calculará un  $Y_{C,teorico}$  teórico a partir de la discretización

elegida para  $C$  y los valores de  $Y_{C,max}$  e  $Y_{C,min}$ . Con este valor, se interpola, para cada  $Z$ , el SR al que corresponde ese valor de  $Y_{C,teorico}$  calculado teniendo en cuenta que cada uno tendrá un  $Y_C$  calculado real. Con este valor de *Strain Rate*, que no será uno de los que se han calculado con LFLAM con toda probabilidad, se interpolarán todos los resultados con el SR al que se dan estos y el nuevo teórico.

Por último, cabrá prestar especial atención a ciertos puntos que son soluciones singulares y que no pueden seguir el procedimiento habitual. Por un lado, las condiciones de contorno. Estas se dan en  $Z=0$  y  $Z=1$ , para todos los SR. En estos puntos no es necesario realizar las interpolaciones, las soluciones a incluir en las tablas son las propias condiciones de contorno para todas las  $C$ .

Otra solución singular que se encuentra es  $C=0$ , la que será la solución inerte. Llegar a esta solución implica realizar el cálculo del último *flamelet*, el *flamelet* de extinción, como un cálculo no estacionario. Sin embargo, dada la imposibilidad de converger un caso de este tipo en LFLAM, se decidió aproximar esta solución resolviendo un *flamelet* estacionario a un SR en el que sea inerte la solución e interpolar los resultados entre el último punto de la rama Upper y el punto de extinción, tal y como se puede apreciar en la Figura 3.2. Este *Strain Rate* de extinción será el que equivalga a  $C=0$  para todo  $Z$ .

Por último, en el Anexo G se muestra también la creación de los archivos explicados previamente en el formato correcto.

### 5.1.3. Interacción química-turbulencia

En el caso de la tabulación turbulenta, como se ha mencionado previamente, las variables se parametrizan en  $C$ , la varianza de  $C$ ,  $Z$  y la varianza de  $Z$ , con el fin de reflejar las fluctuaciones en las propiedades características de este tipo de flujo, se tiene en cuenta que el flujo turbulento afecta al estado termoquímico. Se presenta en el Anexo H.

A diferencia de la tabulación laminar, es necesario definir también la discretización de las varianzas de  $C$  y  $Z$ , que también varían de 0 a 1, pero sin ser necesaria tanta resolución, por lo que se ha elegido discretizarlas en 11 puntos.

Todo el procedimiento es idéntico a la tabulación laminar, pero para contabilizar las interacciones turbulentas, las propiedades tabuladas,  $\psi$  de las tablas laminares deben ser integradas en una función de densidad probabilística de la siguiente manera [38]:

$$\tilde{\psi}(Z, Z_{var}, C, C_{var}) = \int_0^1 \int_0^1 \psi(Z, C) \cdot \tilde{P}(Z, C) dZ dC \quad (5.1)$$

Donde  $\tilde{P}(Z, C)$  es la función probabilística, la cual se asumirá, ya que ha sido demostrado en otros estudios [39], que tiene una forma cercana a una función beta.

Esta integral doble es numéricamente muy complicada de resolver, y son necesarias técnicas numé-

ricas complejas para encontrarle una solución. Sin embargo, con la ayuda de MATLAB mostrada en el Anexo H es posible realizar el cálculo completo sin hacer aproximaciones.

Por último, al igual que en la tabulación laminar, se organiza toda la información haciendo variar las cuatro magnitudes respecto a las que se parametriza.

## 5.2. Integración del modelo en el software Alya

Siguiendo con el *workflow* presentado en la Figura 3.1, el *solver* CFD, Alya, debe tener integradas aquellas ecuaciones de transporte de las variables de parametrización,  $Z$ ,  $Z_{var}$ ,  $Y_C$ ,  $Y_{C,var}$ , así como las dos ecuaciones del hollín,  $N_S$  e  $Y_S$ . Estas dos últimas ecuaciones son muy similares a las implementadas en LFLAM, pero tienen ligeras diferencias propias del modelo de combustión tabulada empleada. Concretamente, presentan la siguiente forma:

$$\rho \frac{\partial Y_S}{\partial t} + \rho U \frac{\partial Y_S}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} [\rho V_S Y_S] + \dot{\omega}_{Y_S} \quad (5.2)$$

$$\rho \frac{\partial N_S}{\partial t} + \rho U \frac{\partial N_S}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} [\rho V_S N_S] + \dot{\omega}_{N_S} \quad (5.3)$$

Donde el término fuente de la Ecuación 5.2 es calculado en Alya de la siguiente forma:

$$\dot{\omega}_{Y_S} = \dot{\omega}_{nucl}^{tab} + \sqrt{A_S} \left( \frac{\dot{\omega}_{sg}}{\sqrt{A_S}} \right)^{tab} + A_S \left( \frac{\dot{\omega}_{ox}}{A_S} \right)^{tab} \quad (5.4)$$

Donde  $A_S$  es el área superficial en  $m^2/m^3$ , que sigue la siguiente ecuación:

$$A_S = \pi d_p^2 N_S = \pi \left( \frac{6 Y_S \rho}{\pi \rho_S N_S} \right)^{1/3} N_S \quad (5.5)$$

Por otro lado, el término fuente de la Ecuación 5.3 es calculado de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\dot{\omega}_{N_S} = \dot{\omega}_{nucl}^{tab} \cdot \frac{2 N_A}{N C_{min} M_S} + \dot{\omega}_{agg} \quad (5.6)$$

Donde el término fuente por aglomeración sigue la siguiente ecuación:

$$\dot{\omega}_{agg} = 2 C_a \left( \frac{6 M_S}{\pi \rho_S} \right)^{1/6} \left( \frac{6 k T}{\rho_S} \right)^{1/2} \left( \frac{\rho Y_S}{M_S} \right)^{1/6} (\rho N_s)^{11/6} \quad (5.7)$$

Por tanto, en las ecuaciones 5.4 y 5.6 se indican los parámetros que obtiene el software para la resolución de las ecuaciones de las tablas y como estos han sido tabulados. Tal y como indican las Ecuaciones 5.4 y 5.6 algunas tasas, correspondientes a los procesos superficiales, se tabulan divididas entre la raíz del área superficial, otras entre el propio área y otras entre nada, pero únicamente aquellas

que no son procesos superficiales, como la nucleación. Todo esto ha sido previamente tenido en cuenta en el proceso de tabulación con LFLAM.

Este proceso de integración de las ecuaciones en el *solver* y comprobación del correcto cálculo numérico ha sido llevado a cabo por Leonardo Pachano Prieto, miembro del *Propulsion Technologies Group* del BSC, *Barcelona Supercomputing Center* con ayuda del equipo de este mismo grupo tecnológico, como principales conocedores del código Alya, creado en este Centro Nacional de Supercomputación.

### 5.3. Evaluación del modelo y validación de la implementación

En esta sección, se llevará a cabo una evaluación del modelo de predicción de hollín implementado en el software CFD Alya. El objetivo es analizar la precisión y validez de la implementación realizada, así como discutir las capacidades y limitaciones del modelo. Frente a los casos reales, turbulentos y 3D, se plantea un caso sencillo, laminar y esencialmente 1D, para controlar mejor si la implementación es correcta.

#### 5.3.1. Caso de estudio en CFD utilizando el modelo implementado

El caso de estudio para la validación de la implementación ha sido presentado con anterioridad, ya que fue empleado también para la selección de las constantes modelo de hollín. Concretamente, se trata de la llama WRC15 [24]. Este experimento consiste en llamas de difusión contrapuestas de etileno.

El *setup* consiste en dos toberas contrapuestas con diámetros de 10 *mm* y una separación entre toberas de 8 *mm*. Las velocidades de salida de ambas toberas se establecieron a 20 *cm/s*. La corriente de oxidante estaba compuesta de un 25 % de  $O_2$  y un 75 % de  $N_2$ . la corriente de combustible estaba compuesta por puro etileno. Por último, el *soot volume fraction* y el *number density* han sido medidos usando extinción de luz y un sistema de *scattering*.

Se muestra en la Figura 5.7 un diagrama representativo de la configuración del caso, señalando con una línea azul la línea donde se han tomado las medidas del experimento, correspondiente con  $X=0$ . Serán los resultados en esta línea los que se comparen con LFLAM.

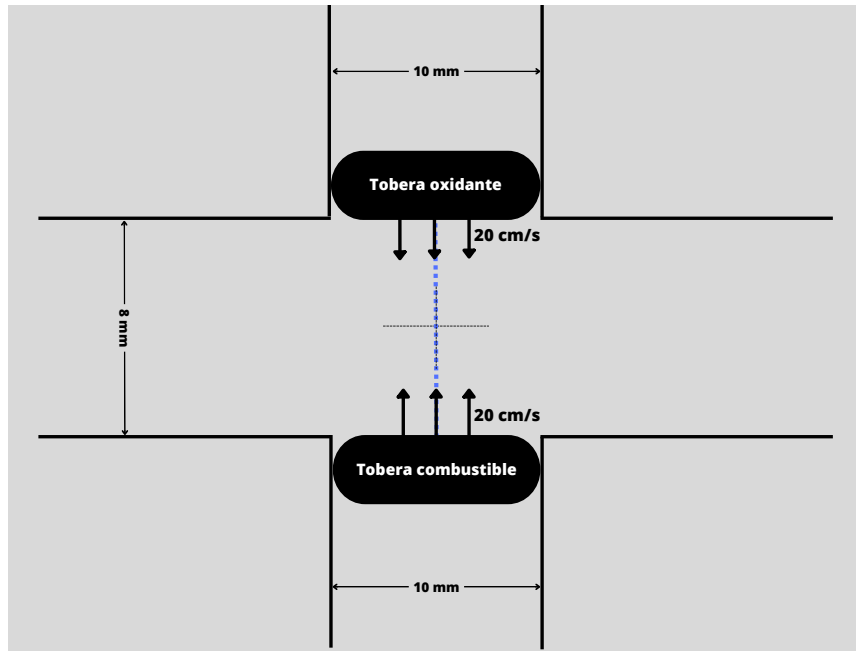


Figura 5.7: Configuración caso WRC15

Se ha creado un caso 2D en Alya representativo del experimento en cuestión. Se muestra esta en la Figura 5.8. Por un lado, en la parte superior está ubicada la tobera del oxidante, del mismo ancho que en el experimento real [24]. En la parte inferior se encuentra la tobera correspondiente al combustible, al igual que la configuración mostrada en la Figura 5.7. Ambas toberas, tal y como se puede apreciar por el mayor refinamiento de la malla en la zona, miden  $10\text{ mm}$ . La distancia entre ambas salidas de flujo que simulan las toberas, es de  $8\text{ mm}$ , tal y como se indica en la Figura 5.7. Se puede ver también de forma clara el mayor refinamiento que se ha comentado que existe en la zona de las dos toberas y todo el espacio que atravesará de forma directa el fluido al salir por esta, donde se predice que existirán los mayores gradientes de propiedades.

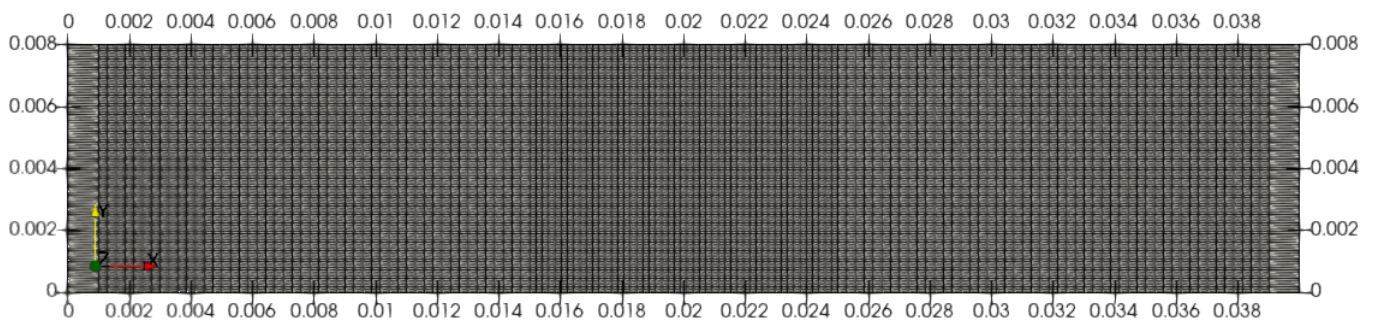


Figura 5.8: Malla caso WRC15. Distancias en  $m$

Cabe destacar que la malla inicial, presentada en la Figura 5.8, es lo suficientemente fina para el

caso en cuestión, por lo que no ha sido necesario realizar un estudio de independencia de malla en este proyecto. Además, se trata de un caso muy sencillo, con lo que una malla de estas características es suficiente. Si se visualiza en detalle la malla, se puede ver lo expuesto en la Figura 5.9. En esta se pueden ver los distintos nodos que componen la malla, donde realmente se resuelven las ecuaciones previamente comentadas. A diferencia de otros *softwares* que resuelven las ecuaciones celda a celda, Alya lo hace nodo a nodo, siendo en consecuencia el resultado de cada celda el promedio de los resultados en todos los nodos que la conforman.

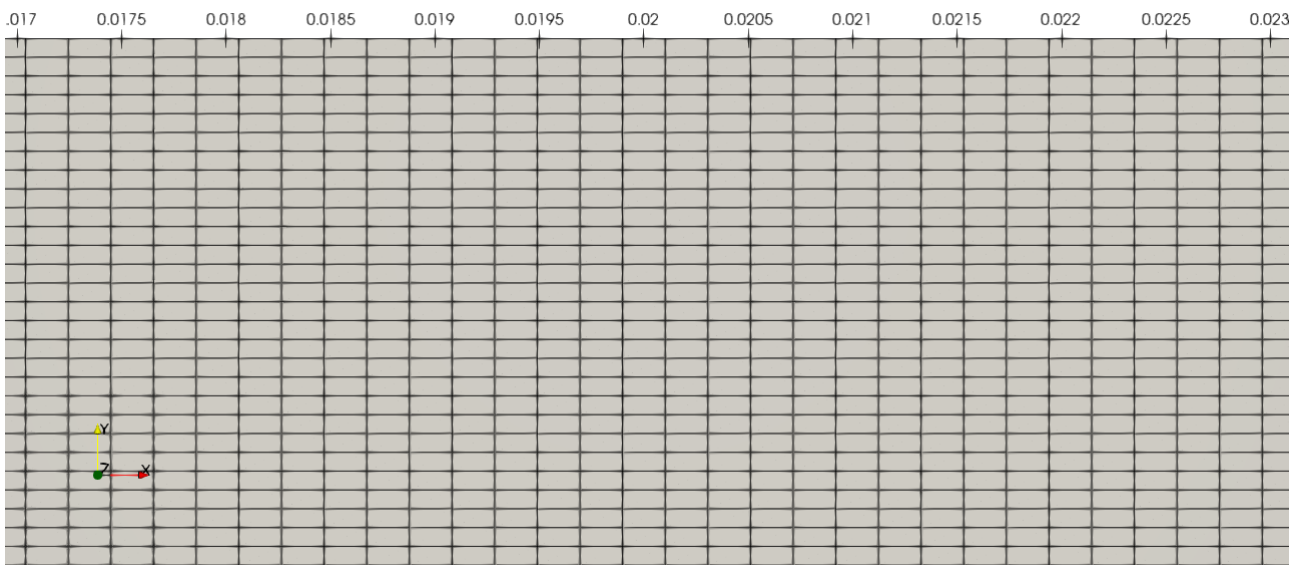


Figura 5.9: Malla en detalle caso WRC15. Distancias en  $m$

### 5.3.2. Análisis de los resultados y comparación con datos experimentales

Una vez calculado el caso, se procede a analizar los resultados de este. En primer lugar, se presenta en la Figura 5.10 el contorno de velocidades del caso de la llama WRC15. En este se puede ver el patrón que sigue el flujo en una configuración de *counterflow*. Además, se ha representado como una línea blanca la isolínea de velocidad axial nula, con el fin de identificar las localizaciones de los *stagnation points*, o puntos de estancamiento. Estos se tratan de puntos en los que las líneas de flujo se detienen y cambian de dirección. Es importante localizarlos ya que se tratan de los puntos donde la presión es máxima.

Como se puede apreciar, en la zona donde ambos flujos se encuentran en contraposición, la velocidad es prácticamente 0, ya que se contrarresta la velocidad en una dirección con la otra. Sin embargo, en las zonas donde el flujo tiene una mayor libertad y no la otra tobera sí que notablemente mayor. Además, se encuentran otros puntos de estancamiento a los lados de las toberas, donde se produce la recirculación del flujo.

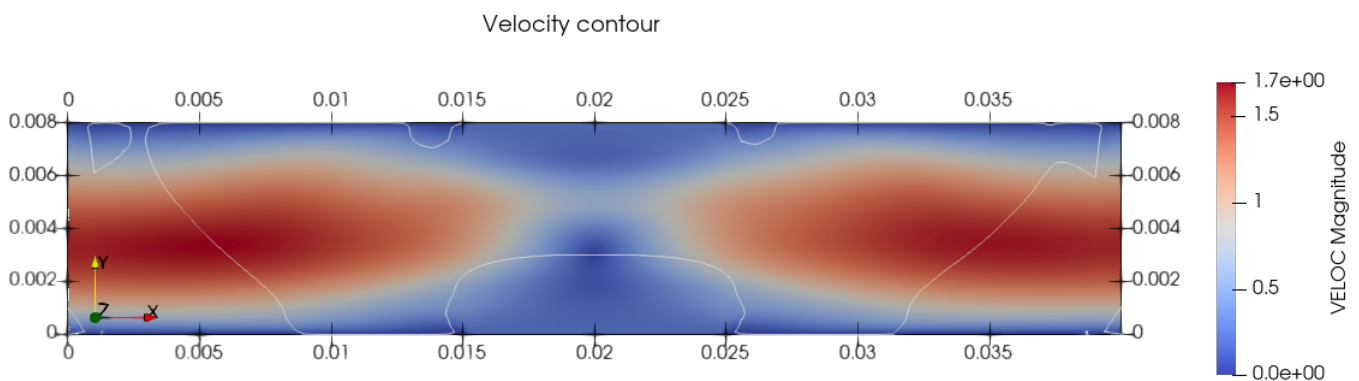


Figura 5.10: Contorno de velocidad. Distancias en  $m$

Por otro lado, es interesante mostrar también el contorno de la fracción de mezcla, con el fin de ilustrar el campo de mezcla de una llama *counterflow*. Este se puede apreciar en la Figura 5.11. Tal y como es de esperar, esta magnitud vale 0 o valores muy próximos a este cerca de la tobera de oxidante, y valores iguales o cercanos a 1 alrededor de la tobera de combustible. En aquella zona cercana a la fracción de mezcla estequiométrica, equivalente a  $Z_{esteq} = 0,075039$  y valores algo superiores para la configuración de este caso, es donde se producirá principalmente la llama.

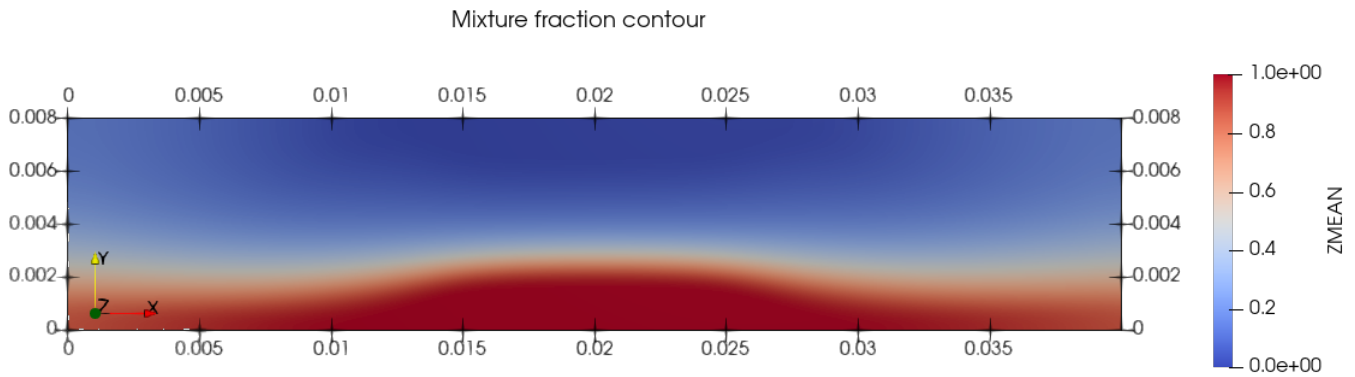


Figura 5.11: Contorno de fracción de mezcla. Distancias en  $m$

Con el fin de definir mejor la localización de la llama, se presenta en la Figura 5.12 el contorno de temperaturas obtenido.

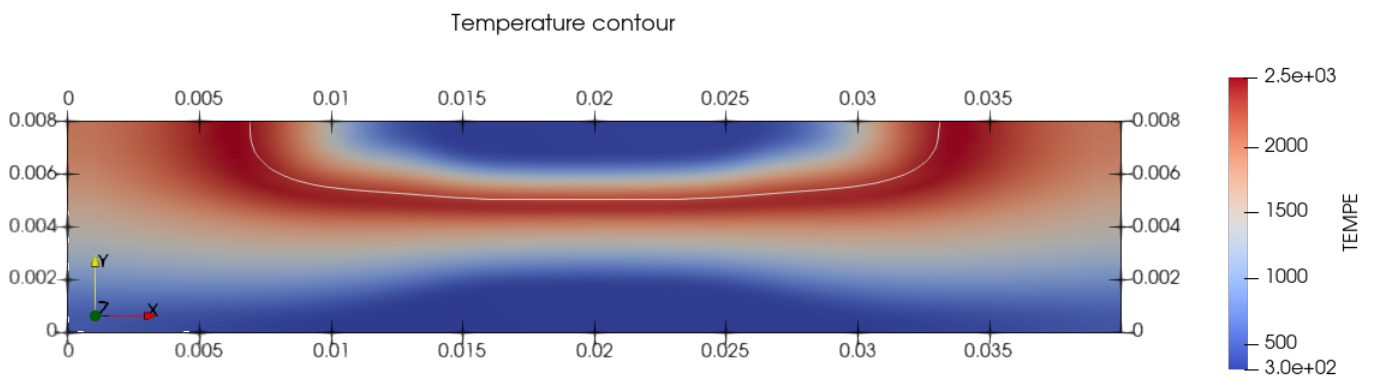


Figura 5.12: Contorno de temperatura. Distancias en  $m$

Se puede observar que la temperatura máxima envuelve a la isolínea de fracción de mezcla estequiométrica, ya que es realmente en ese punto y los puntos circundantes en los que se está produciendo la reacción estacionaria.

Por otro lado, también es interesante visualizar el contorno de la variable de progreso adimensionalizada, el cual es muy similar al contorno de la temperatura mostrado en la Figura 5.12, ya que esta marca el punto de la reacción en el que se encuentra cada parte del dominio. Se muestra dicho contorno en la Figura 5.13.



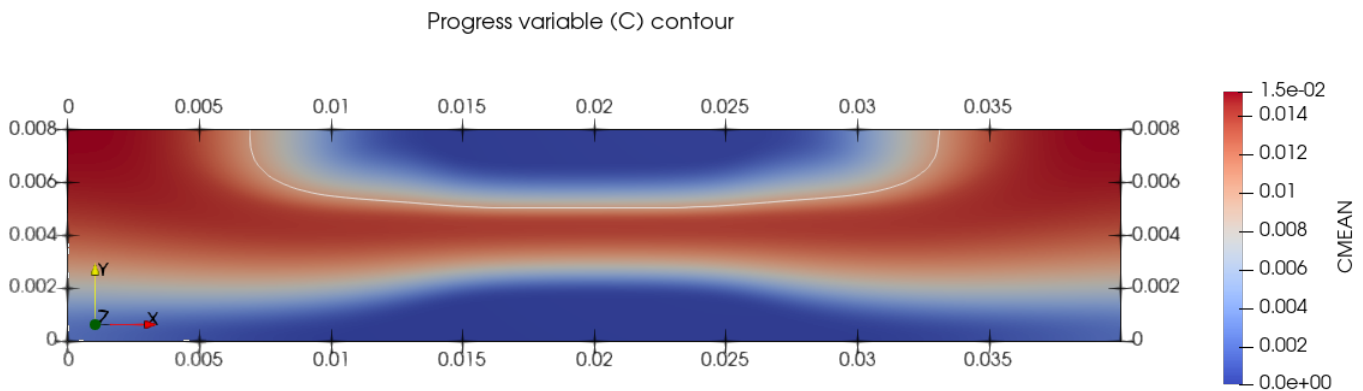


Figura 5.13: Contorno de variable de progreso. Distancias en  $m$

A continuación se muestran los contornos de las especies más relevantes producto o productos intermedios de la combustión, como lo son el  $OH$ , el  $O_2$  por exceso de este, el  $CO_2$ , el  $CO$ , el  $N_2$  y finalmente el  $C_2H_4$  por exceso de este también.

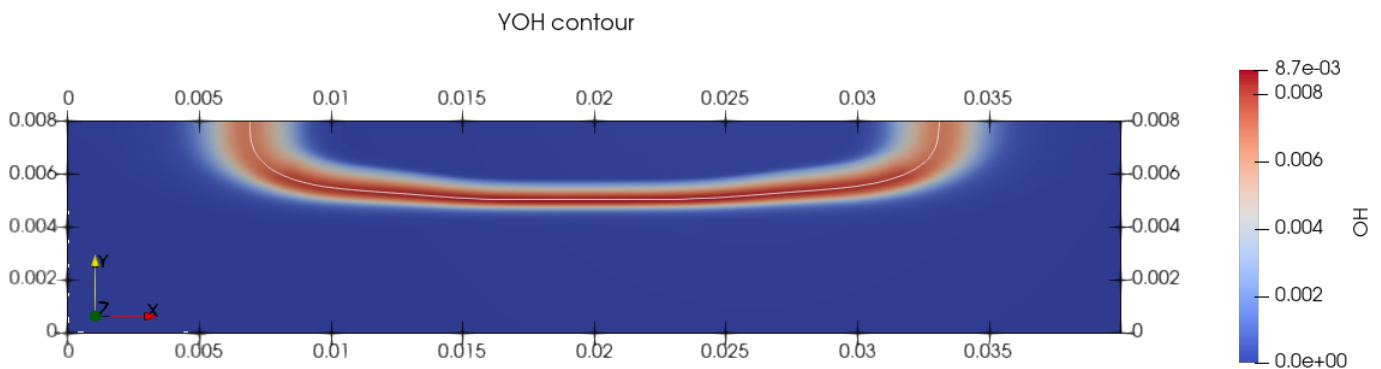


Figura 5.14: Contorno de  $YOH$ . Distancias en  $m$

Este primer contorno, mostrado en la Figura 5.14, es de gran importancia en el análisis del modelado de la combustión. La cantidad de  $OH$  es importante en la definición del frente de llama porque marca la separación entre el gas quemado y el gas sin quemar, ya que este aparece principalmente en el frente, donde se está produciendo la reacción química. La propagación de la llama se efectúa en el frente de llama, y la velocidad de reacción depende de la transmisión de calor entre la llama y las zonas contiguas (gases quemados y no quemados). La cantidad de  $OH$  es un indicador de la presencia de especies químicas reactivas, la temperatura y la velocidad de reacción en la región del frente de llama.

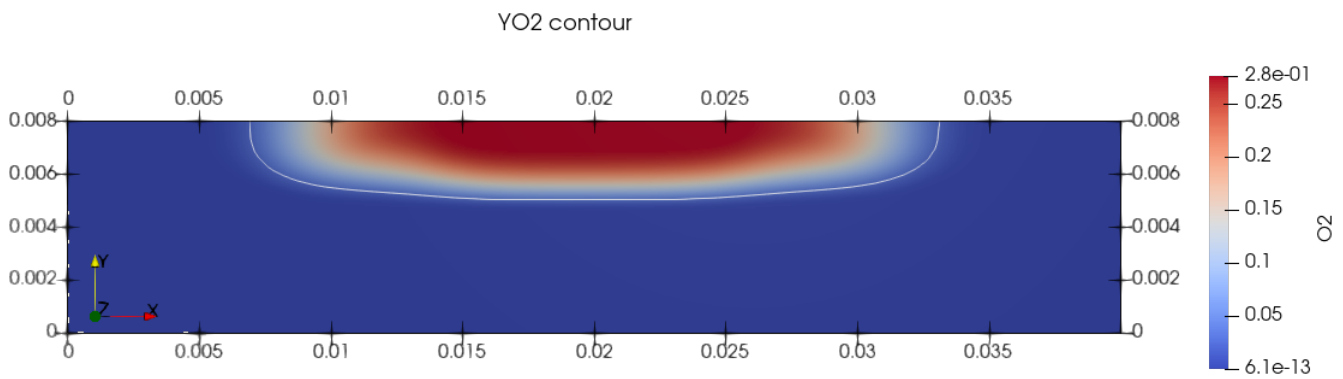


Figura 5.15: Contorno de  $YO_2$ . Distancias en  $m$

Tal y como era de esperar, el exceso de  $O_2$  al final de la combustión se encuentra en la zona de la tobera de oxidante, ya que a esa zona no llega combustible que quemar.

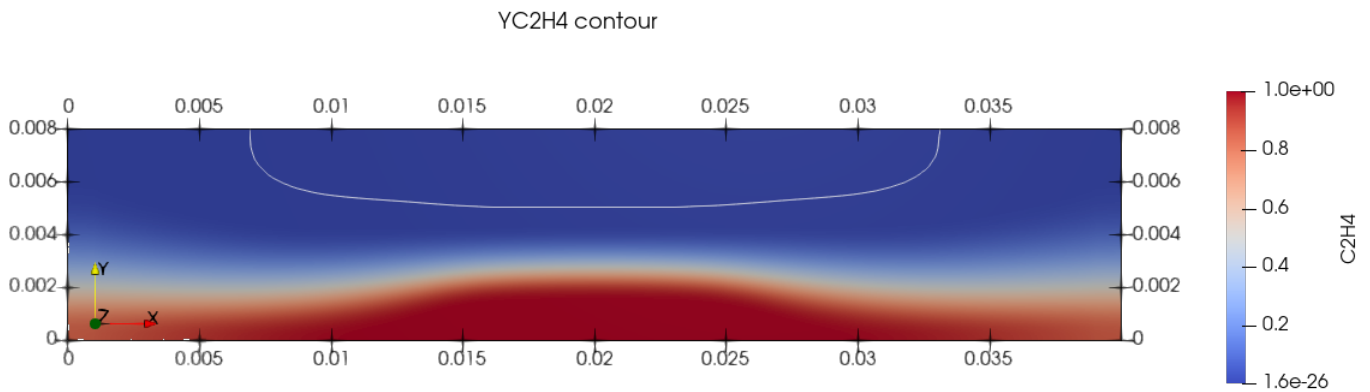


Figura 5.16: Contorno de  $YC_2H_4$ . Distancias en  $m$

Si se observa, por el contrario, el contorno del combustible, mostrado en la Figura 5.16, se puede apreciar que el restante de este se encuentra en la zona cercana a la tobera de *fuel*, donde tampoco ha podido llegar oxidante para quemarlo.

Por otro lado, se muestra las fracciones másicas de  $CO_2$  y  $H_2O$  en las Figuras 5.17 y 5.18. Estos dos son los productos mayoritarios de la combustión cuando esta es completa. Por ello, se puede ver que se concentra la existencia de estos productos principalmente en la zona de reacción de la llama estacionaria, donde se asegura que la combustión es prácticamente completa.

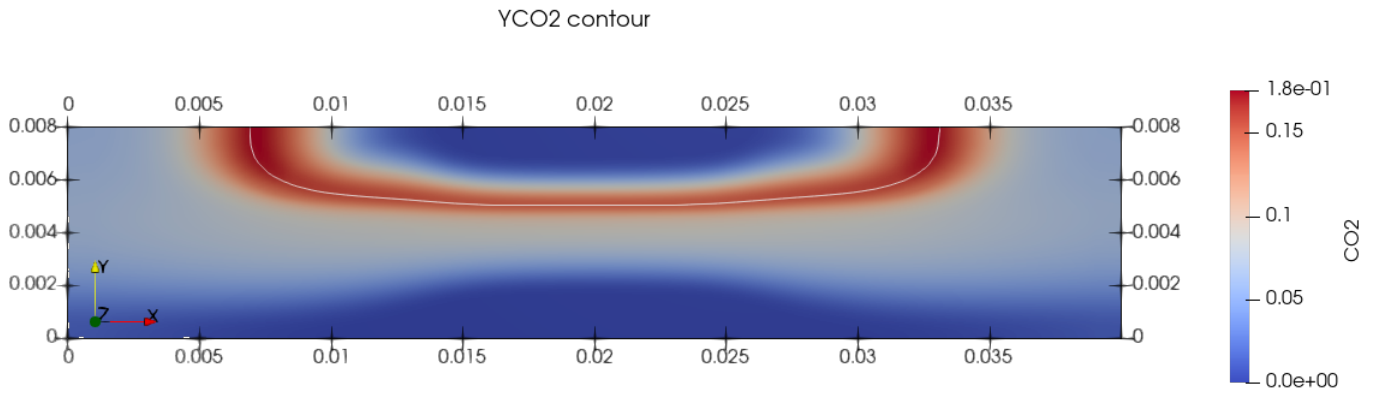


Figura 5.17: Contorno de  $YCO_2$ . Distancias en  $m$

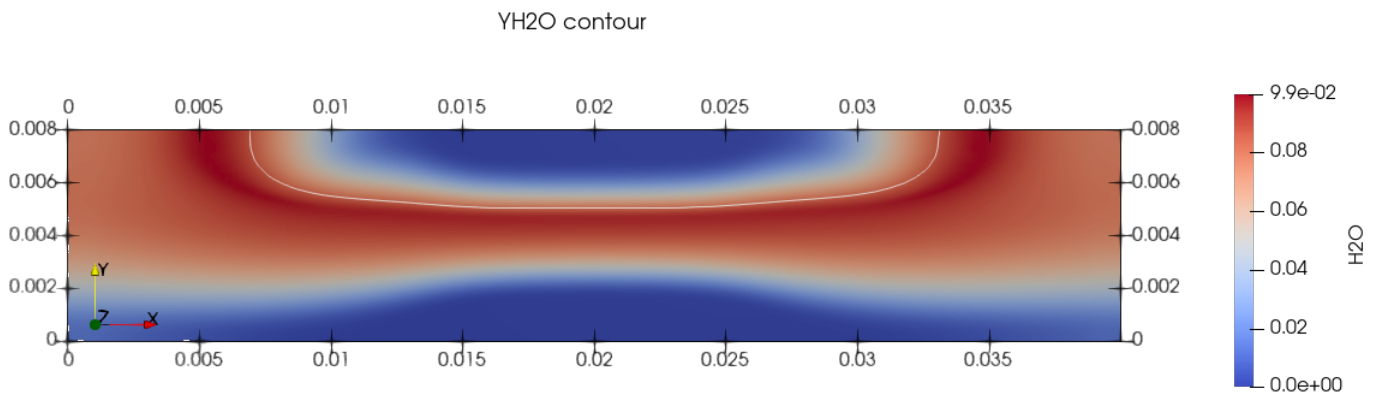


Figura 5.18: Contorno de  $YH_2O$ . Distancias en  $m$

En la Figura 5.19 se muestra el contorno de uno de los productos intermedios de la combustión, que predominan en zonas en las que esta no se ha completado, indicador de una combustión incompleta.

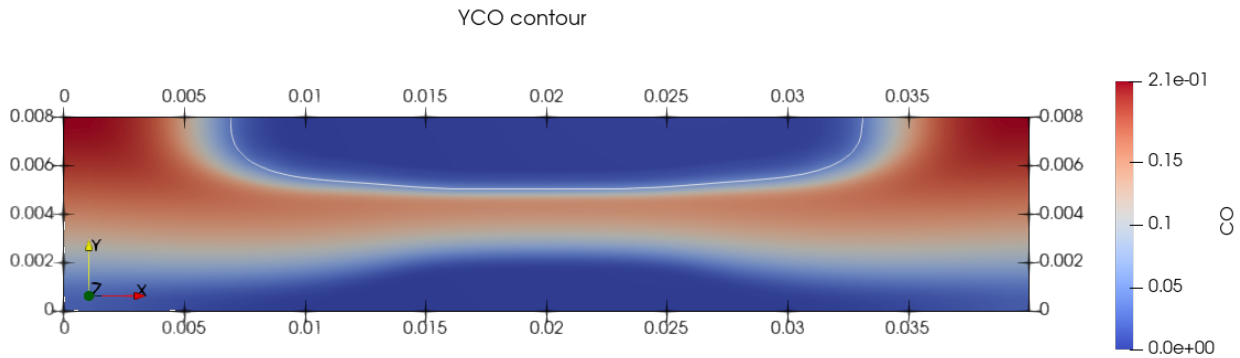


Figura 5.19: Contorno de  $Y_{CO}$ . Distancias en  $m$

Por último, en relación con el hollín, se muestra en las Figuras 5.20 y 5.21 los precursores más importantes de hollín previamente considerados. En aquellas zonas en las que estos predominen, serán las zonas en las que cabrá esperar más cantidad de hollín.

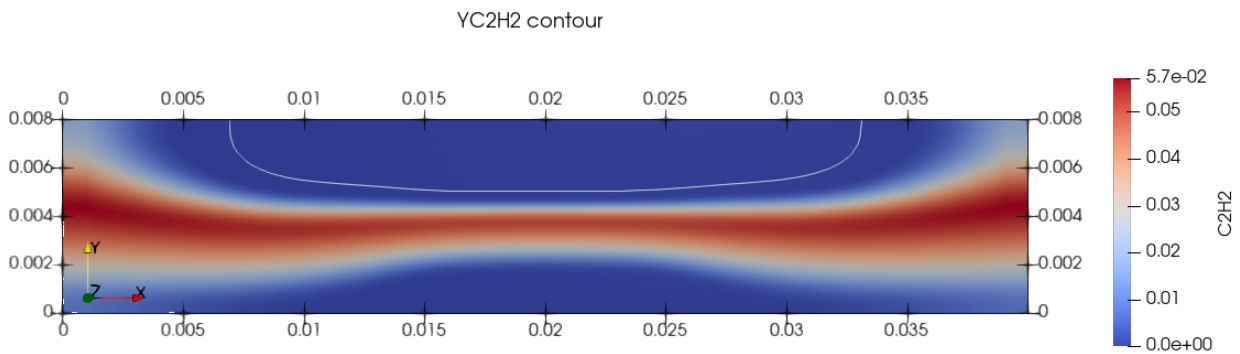


Figura 5.20: Contorno de  $Y_{C_2H_2}$ . Distancias en  $m$

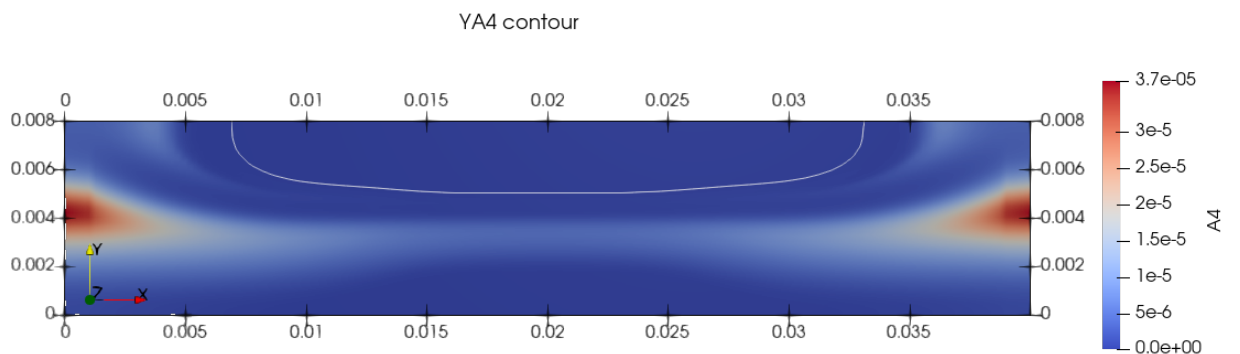


Figura 5.21: Contorno de  $Y_{A_4}$ . Distancias en  $m$

Como se puede apreciar, los máximos de ambos hidrocarburos se dan en lugares diferentes del dominio, sin embargo, resulta interesante fijarse en la línea central ya que, aunque el valor de  $A_4$  parezca muy bajo, en comparación con otras zonas del dominio se puede ver como es notablemente mayor al resto.

Por otro lado, dependiendo del submodelo de hollín considerado, en los cálculos se encontrará una mayor cantidad de hollín en una zona u otra. En el caso del presente análisis, en el cual se usa el submodelo 1, que considera la nucleación por acetileno, se espera encontrar más cantidad de hollín en aquellas zonas de la Figura 5.20 en las que se encuentren los máximos, aunque realmente, en ambos casos, es esperable que se genere el hollín en esa zona rica más cercana a la corriente de fuel.

Una vez analizada la fase gas, se puede visualizar el resultado de la predicción de hollín.

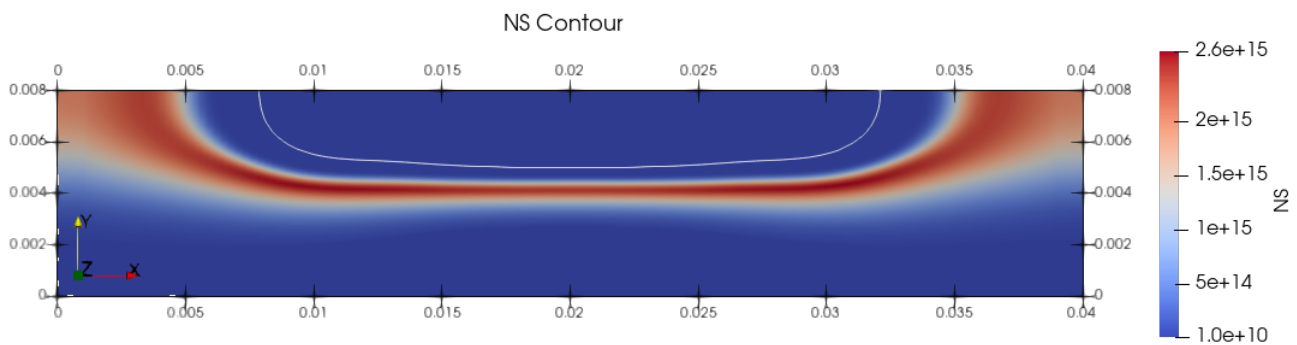


Figura 5.22: Contorno de  $N_S$ . Distancias en  $m$

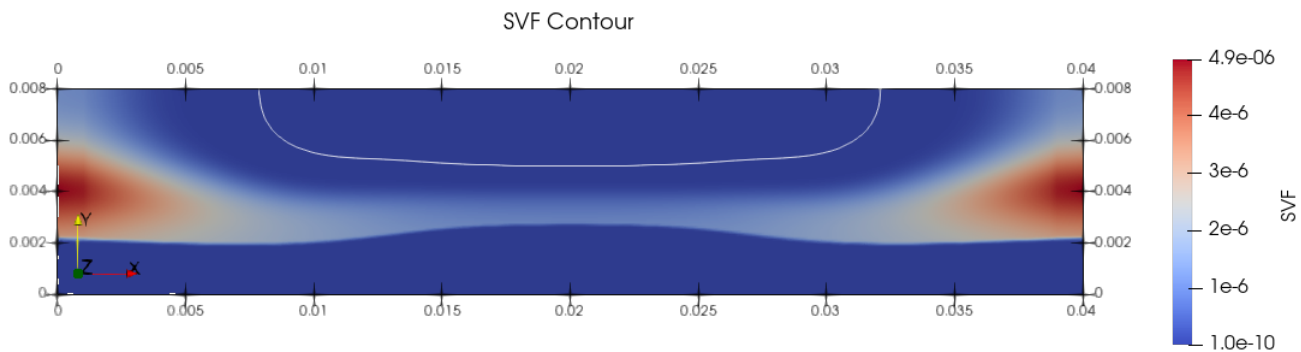


Figura 5.23: Contorno de  $SVF$ . Distancias en  $m$

Tal y como se puede apreciar, encontramos la mayor densidad de partículas en la zona cercana a la tobera de combustible, y también alrededor de la de oxidante, en una de las zonas en las que más alta es la temperatura según la Figura 5.12, lo cual propicia una mayor aparición del hollín. Concretamente, se encuentra principalmente a aquellos lugares donde la fracción de mezcla vale alrededor de 0,15. Teniendo en cuenta que la fracción de mezcla estequiométrica es aproximadamente 0,07, marcada por

la isolínea blanca, el máximo en el hollín se encuentra en aquellas zonas que equivalen a un dosado de 2 aproximadamente, un dosado muy rico.

Por otro lado, en la Figura 5.23 se puede apreciar la fracción volumétrica de hollín en todo el dominio. De nuevo, ocurre algo similar al caso de  $N_S$ , y encontramos los mayores valores de este parámetro en los dosados más altos.

En ambos contornos, dada la imposibilidad de contrastar la veracidad de estos resultados en todo el dominio, es importante fijar la atención en el orden de magnitud de ambas variables basándolos en los resultados expresados en el Capítulo 4. De este modo podemos ver que ambos parámetros se encuentran dentro de los rangos esperados.

### 5.3.3. Discusión de la exactitud del modelo y validez de la implementación

A continuación, se muestra en la Figura 5.24, la comparativa entre los datos de temperatura experimentales, los datos extraídos del cálculo CFD, medidos sobre la línea central, y los datos extraídos de LFLAM.

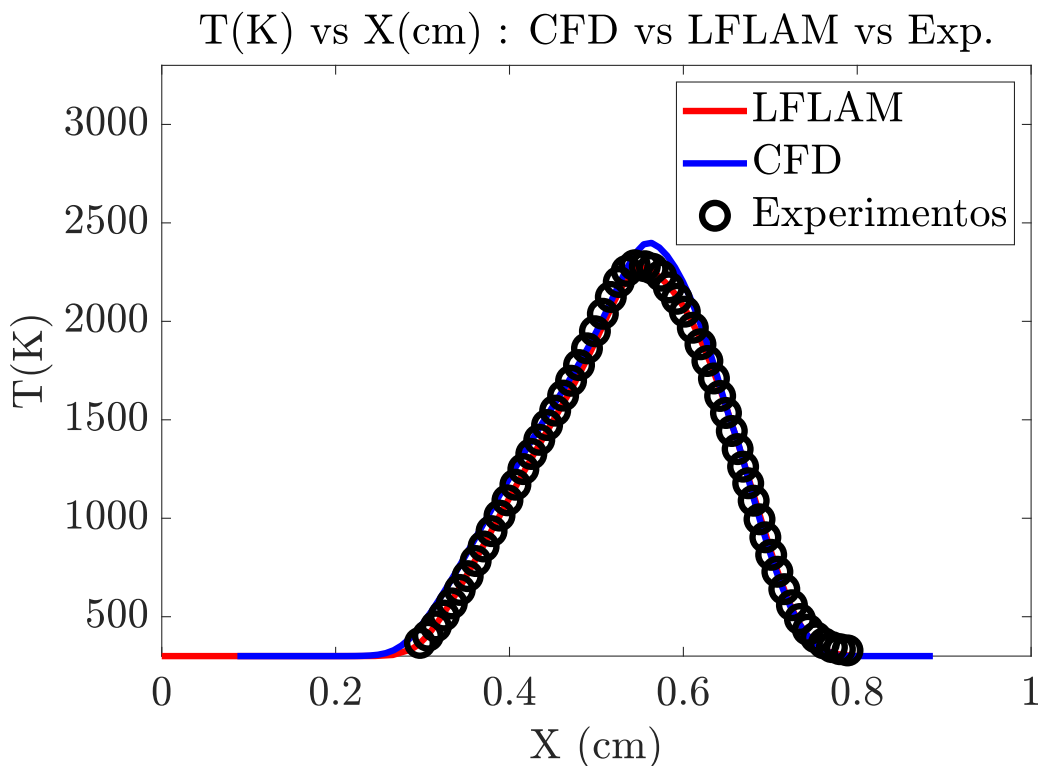


Figura 5.24: Análisis implementación T(K) vs X(cm) para cada dato calculado

Se puede ver que tanto el CFD, tomando la línea central de los cálculos, ya que es en la que se han tomado las medidas experimentales, como los cálculos de LFLAM al *Strain Rate* correspondiente,

reproducen prácticamente a la perfección el perfil de temperatura de esta configuración calculada. Se puede apreciar también que los resultados de Alya sobrepredicen con un error inferior al 5% los datos obtenidos experimentalmente. Sin embargo LFLAM, considerando un único *Strain*, tiene también un error menor al 5% pero subprediciendo el resultado. Ambos se consideran totalmente válidos y muy buenas aproximaciones del resultado final.

Cabe destacar que la variable de la temperatura es una variable derivada de una ecuación de transporte resuelta en CFD, la ecuación de la energía. La temperatura se recupera a partir de esta y los coeficientes de calor específico a presión constante, extraídos de las tablas. Es por ello por lo que se esta variable sí que refleja que la implementación y resolución de las ecuaciones de transporte es correcta, ya que sí que implica que el CFD está reproduciendo las condiciones de la llama. Existen otros parámetros que son tabulados, resueltos en los *flamelets* y el CFD simplemente los recupera de la tabla a partir de las variables de control.

Por otro lado, se muestran en las Figuras 5.25 y 5.26 la comparativa de los resultados para las variables de hollín, resultado de la implementación del modelo de dos ecuaciones.

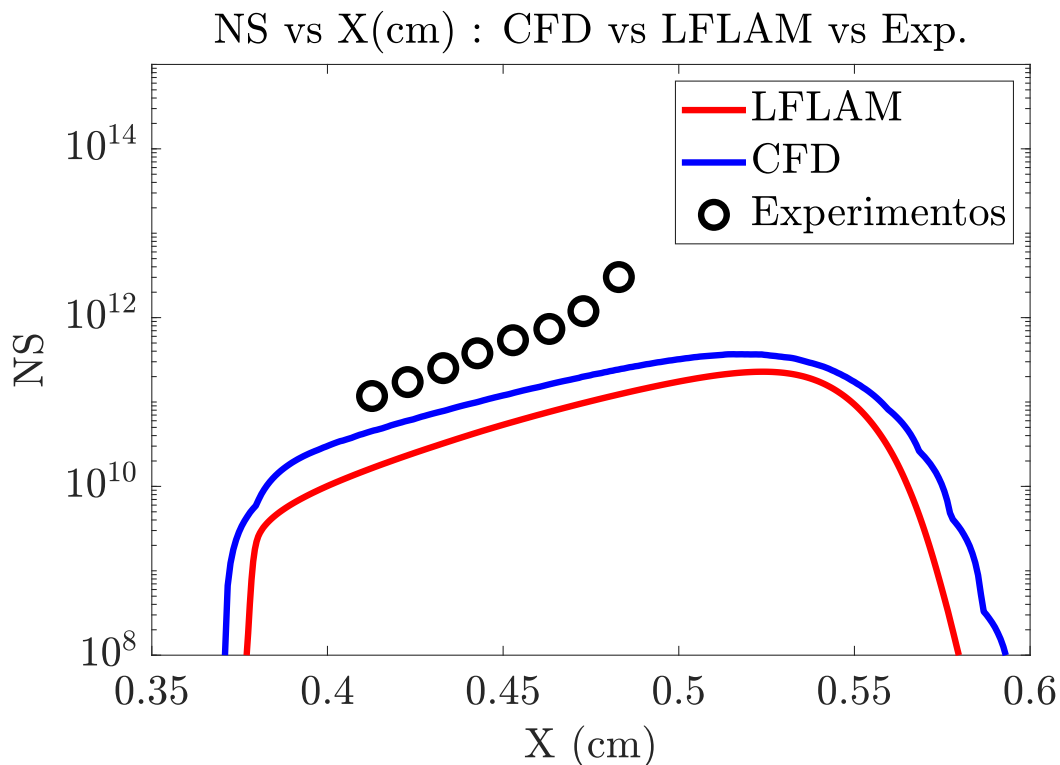


Figura 5.25: Análisis implementación NS(1/cm<sup>3</sup>) vs X(cm) para cada dato calculado

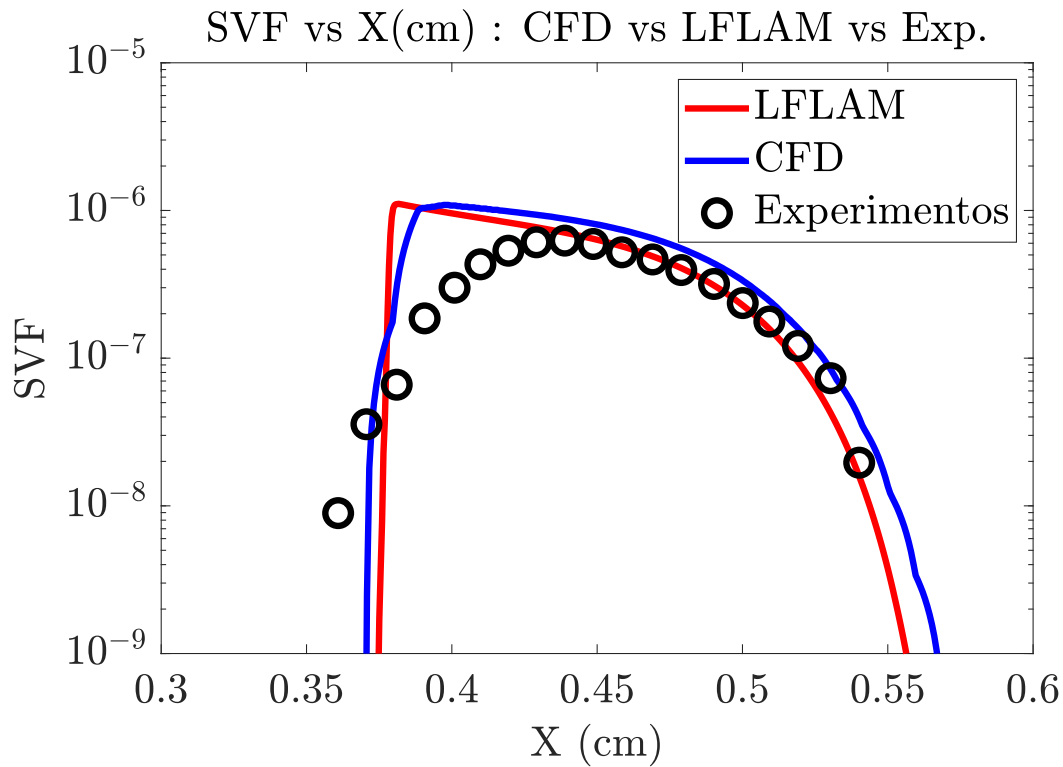


Figura 5.26: Análisis implementación SVF(-) vs X(cm) para cada dato calculado

Por un lado, en la Figura 5.25 se puede ver como, basándose en el mismo modelo de hollín, el tratar a la llama como bidimensional en CFD, algo mucho más cercano a la realidad, proporciona un resultado más preciso y aproximado a los datos experimentales de  $N_S$ , prediciendo también correctamente la tendencia de este parámetro.

Por otro lado, los resultados de SVF son también bien representados tanto por LFLAM como por el CFD. A pesar de ello, tanto en el caso de  $N_S$  como de SVF, se puede ver que el CFD predice un resultado algo mayor que LFLAM respecto a cantidad de hollín, lo cual resulta positivo dado que LFLAM subpredice los resultados de  $N_S$ .

Con todo esto, se puede ver que los resultados de la implementación del modelo de hollín y el modelo FGM de combustión han sido satisfactorios.



## Capítulo 6

# Conclusiones y trabajos futuros

### 6.1. Resumen de los hallazgos y logros alcanzados

Tal y como se puede apreciar en el capítulo 5, la implementación del modelo de hollín de dos ecuaciones en Alya ha sido exitosa, y reproduce de forma bastante precisa los resultados de los *flamelets*, incluso para el caso inerte.

Por tanto, recapitulando los objetivos expuestos en el Capítulo 1, se puede afirmar que se ha convertido LFLAM en una herramienta perfectamente manejable por cualquiera que no pertenezca al grupo de investigación que desarrolló este software. Este objetivo ha sido cumplido a partir de la creación de diferentes *scripts* interactivos que detallan el procedimiento seguido, así cómo qué parámetros es probable que se deban cambiar en un momento determinado (como el considerar o no radiación).

Por otro lado, se ha logrado también validar el modelo de dos ecuaciones de hollín y seleccionar el submodelo más preciso dentro de los 5 submodelos implementados en LFLAM. Para ello ha sido necesario comparar con numerosas configuraciones de dos experimentos diferentes, obteniendo en ambos las mismas conclusiones. Se puede concluir que aunque con algunos submodelos se obtienen resultados razonables, es difícil que todos ellos se ajusten idealmente a la realidad y depende mucho del ajuste de los parámetros para cada caso en concreto. Aún así, es evidente que LFLAM reproduce bastante bien la fase gas, incluso los aromáticos, y los resultados de *soot* son satisfactorios.

Por último, tal y como se avanzaba, se ha podido crear una rutina automatizada de tabulación genérica para casos laminares, turbulentos, con y sin hollín. Esta rutina ha permitido implementar el modelo de 2 ecuaciones en Alya y resolver la combustión con un modelo FGM de bajo coste computacional y resultados muy coherentes. Además, se ha comprobado que todo funciona según lo previsto con un caso de referencia laminar. Esta integración ha abierto nuevas posibilidades para la aplicación del modelo en la industria y la investigación, permitiendo mejorar la eficiencia y la sostenibilidad en el diseño de sistemas de combustión.

Es importante destacar que los resultados y las metodologías desarrolladas en este estudio tienen un alcance más amplio y pueden ser transferibles a otros contextos industriales. La capacidad de predecir y controlar la formación de hollín en sistemas de combustión tiene implicaciones en la reducción de emisiones contaminantes y el diseño de sistemas más sostenibles en diferentes sectores.

En resumen, este trabajo ha logrado importantes avances en la predicción y comprensión de la formación de *soot* en quemadores de turbinas de gas. Los resultados obtenidos, la validación del modelo, la integración en el software CFD y las contribuciones al conocimiento existente demuestran el potencial de esta investigación para mejorar la eficiencia y la sostenibilidad en sistemas de combustión. Este trabajo sienta las bases para futuras investigaciones y aplicaciones prácticas en la industria, con el objetivo de lograr sistemas de combustión más limpios y respetuosos con el medio ambiente.

## 6.2. Limitaciones y posibles trabajos futuros

Teniendo en cuenta la gran importancia y dedicación que está invirtiendo en la predicción de emisiones, dando lugar a nuevas investigaciones casi diarias, principalmente sobre el hollín y otras como los  $NO_x$ , este trabajo podría seguir ampliándose tanto como se deseara.

Sin embargo, existe un camino claro que realizar con el fin de terminar de implementar y validar una herramienta completamente válida para la industria.

Por un lado, la realización de todo el proyecto, tanto la validación como la tabulación y los cálculos CFD, se han realizado en régimen laminar, es decir, sin tener en cuenta el efecto de la turbulencia en la química de la reacción. Sin embargo, la gran mayoría de quemadores hoy en día, tal y como se ha explicado al inicio del trabajo, implementan diferentes tecnologías que provocan una mejor y más rápida mezcla entre el combustible y el oxidante. El uso de estas nuevas tecnologías implica, por lo general, aumentar la turbulencia del flujo. Es por ello que sería crucial comprobar la validez de la tabulación turbulenta, mostrada en el Anexo H, su implementación y el cálculo realizado basado en *flamelets*. Así, se podría acotar de una forma más precisa el rango de utilización del modelo y el grado de reproducción de los resultados en situaciones menos idílicas. Se propone esta continuación, primero realizando la implementación sin hollín y después con este, como ampliación.

Por otro lado, el cálculo de validación de la implementación en CFD ha sido realizado en 2D, por lo que el siguiente paso sería realizar casos algo más complejos y en 3D, tanto laminares como turbulentos para comprobar el correcto y preciso cálculo de esta nueva herramienta.

Además, el modelo ha sido probado con etileno como combustible, y aunque se ha comprobado también durante la realización del presente trabajo la posibilidad de cálculo considerando otros hidrocarburos como combustibles sin problema alguno, sería interesante realizar toda la metodología de cálculo y tabulación con hidrocarburos SAFs. Para ello, se haría uso del mecanismo mostrado en la

Tabla 2.1, el cual ya ha sido comprobado su buen cálculo con LFLAM.

Por último, con el fin de crear la herramienta lo más precisa posible sería conveniente realizar el análisis paramétrico exhaustivo mencionado en el Capítulo 4, con el fin de encontrar el conjunto de constantes que más eficientemente predican la formación de hollín, pudiendo también considerar la nucleación por  $A_4$ , ya que es lo que se estima más preciso actualmente, pero que reproduzca mejor los experimentos, a la altura o mejor que el caso del Submodelo 1.

El análisis realizado en el presente trabajo, junto a los trabajos futuros aquí descritos darían lugar a una herramienta robusta y eficiente que permitiría predecir las emisiones de partículas de hollín en diferentes combustores y numerosas configuraciones, pudiendo así buscar de una forma poco costosa los mejores diseños teniendo en cuenta el impacto en nuestra salud y en el medio ambiente.



# Capítulo 7

## Pliego de condiciones

### 7.1. Introducción

En el presente capítulo se detallarán los anexos relacionados con la normativa vigente respecto a las ordenanzas de seguridad, higiene y salud que han sido debidamente aplicadas durante el desarrollo del presente proyecto. Las condiciones de trabajo descritas deben cumplirse en los dos lugares donde se realiza el trabajo, tanto en el edificio CMT - Motores Térmicos, como en el domicilio particular de la autora del documento.

Estas ordenanzas están basadas en el Real Decreto 486/1997, del 14 de abril, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en los lugares de trabajo, garantizando el cumplimiento de la Ley 31/1995, del 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales.

### 7.2. Condiciones generales de seguridad en los lugares de trabajo

El Anexo I de este Real Decreto se refiere a las condiciones que se deben cumplir en el lugar de trabajo. Este anexo se divide en diferentes apartados:

- **Apartado 1:** se refiere a la seguridad estructural. Establece que los edificios deberán poseer estructura y solidez apropiadas a su tipo de uso, además de un sistema de armado que garantice la estabilidad de estos. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.
- **Apartado 2:** se refiere a los espacios de trabajo y zonas peligrosas. Establece las dimensiones mínimas de los locales de trabajo, además de la separación entre elementos materiales, que garanticen en todo momento la seguridad de los trabajadores. Por otro lado, las zonas donde exista riesgo de caída o peligro se deberán señalar. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.
- **Apartado 3:** se refiere a los suelos, aberturas y desniveles, y barandillas. Los suelos deben

ser fijos y estables, las aberturas o desniveles peligrosos deben estar protegidos con barandillas rígidas. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

- **Apartado 4:** se refiere a los tabiques, ventanas y vanos. Establece que los tabiques transparentes o acristalados deben estar correctamente señalizados y fabricados con materiales seguros. Se deben poder realizar las operaciones de apertura, cierre o limpieza con seguridad. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.
- **Apartado 5:** se refiere a las vías de circulación. Tanto las exteriores como las interiores deberán poder utilizarse con seguridad y de forma fácil. Además, establece tamaños mínimos para estas vías de circulación. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.
- **Apartado 6:** se refiere a las puertas y portones. Establece normas de seguridad para las puertas, tales como sistemas de seguridad que impidan caídas que pongan en riesgo la seguridad, o sistemas de reducción de riesgo en caso de rotura. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.
- **Apartados 7, 8 y 9:** se refieren a las rampas, escaleras fijas y de servicio, escalas fijas y escaleras de mano. Impone unas dimensiones mínimas obligatorias para estos elementos. Los lugares de trabajo cumplen estos requisitos.
- **Apartado 10:** se refiere a las vías y salidas de evacuación. Se mencionan medidas respecto a las dimensiones y número de estas en el edificio, además de la posibilidad de apertura de dichas salidas en caso de emergencia. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.
- **Apartado 11:** se refiere a la protección contra incendios. Establece que los edificios deberán poseer los equipos necesarios que garanticen poder combatir incendios, además de la accesibilidad de dichos equipos en el edificio. Por otro lado, la instalación eléctrica no deberá tener riesgo de incendio o explosión. Los lugares de trabajo cumplen estos requisitos.
- **Apartados 12 y 13:** se refiere a la instalación eléctrica y a minusválidos. El edificio debe estar acondicionado para el uso de personas minusválidas. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

### 7.3. Orden, limpieza y mantenimiento

En este Anexo del Real Decreto se mencionan, en primer lugar, requerimientos en cuanto a la inexistencia de obstáculos en las vías de circulación. Además, se establecen condiciones mínimas de limpieza de los lugares de trabajo y dichas tareas no deben entrañar riesgo para los trabajadores.

Por otro lado, se establece la necesidad de llevar a cabo tareas de mantenimiento en el edificio que garanticen la seguridad y salud de los trabajadores. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

#### **7.4. Condiciones ambientales de los lugares de trabajo**

El Anexo III del Real Decreto 486/1997 presenta disposiciones sobre las condiciones ambientales de los lugares de trabajo. Estas condiciones se cumplen, ya que la exposición a las condiciones ambientales de los lugares de trabajo no debe suponer un riesgo para la seguridad y la salud de los trabajadores, además de que no constituyen una fuente de incomodidad o molestia. La temperatura nunca sale del rango entre 17 y 27°C, y la humedad relativa se sitúa siempre entre el 30 y el 100 %. No se sobrepasan tampoco las corrientes de aire de 0,25 m/s. En cuanto a la ventilación del lugar del trabajo aseguran una efectiva renovación del aire del local de trabajo. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

#### **7.5. Iluminación de los lugares de trabajo**

El Anexo IV establece unas condiciones mínimas de iluminación con la finalidad de garantizar la seguridad y salud de los trabajadores. Se exigen unos niveles mínimos de iluminación de las zonas de trabajo, priorizando siempre la iluminación natural. La distribución de la luz deberá ser adecuada y se deberán evitar los deslumbramientos indirectos producidos por superficies reflectantes. Puede ser necesario un alumbrado de emergencia de evacuación y seguridad. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

#### **7.6. Servicios higiénicos y locales de descanso**

En el Anexo V se menciona que los lugares de trabajo deberán contar con agua potable. Se establecen unos requisitos mínimos para vestuarios, duchas, lavabos y retretes. Será necesario disponer de un local de descanso con fácil acceso cuando la seguridad o salud de los trabajadores así lo exija. Si se realizan trabajos al aire libre lejos del lugar de residencia de los trabajadores se deberá disponer de locales adecuados destinados a dormitorios y comedores. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

#### **7.7. Material y locales de primeros auxilios**

El Anexo VI establece que se deberá contar con material para primeros auxilios en caso de accidente, siendo este adecuado en cuanto a cantidad y características, de acuerdo con el número de trabajadores y a los riesgos a los que están expuestos. Dicho material deberá ser revisado periódicamente. Establece

elementos mínimos que se deben poseer si se cumplen unos ciertos requisitos en cuanto a número de trabajadores. Los lugares de trabajo cumplen este requisito.

## 7.8. Sobre el impacto de la huella de carbono

La realización de este proyecto produce un impacto sobre el medioambiente. La huella de carbono es una medida de dicho impacto que se lleva a cabo a causa de la realización de una actividad por parte de un individuo u organización, en este caso debido a la realización del Trabajo de Fin de Grado. Se mide en toneladas de  $CO_2$  y se halla una equivalencia entre este y los GHG. Para la estimación se utilizarán datos relativos al consumo eléctrico y amortización de los dispositivos informáticos que se presentan en el capítulo anterior. Para el cálculo de la huella de carbono se utiliza una calculadora denominada *Carbon Footprint* [40].

En la Tabla 7.1 se presentan los datos relativos al impacto medioambiental. Se puede observar cómo la huella de carbono producida es de 0,14 toneladas de  $CO_2$ . Aún siendo reducida porque no se ha considerado el transporte, sirve para remarcar que se ha tenido un impacto sobre el medioambiente, hecho obviado en numerosas ocasiones pero que tiene una gran importancia.

<b>Huella de carbono</b>	
<b>Concepto</b>	<b><math>CO_2(ton)</math></b>
<b>Electricidad</b>	0.07
<b>Amortización de dispositivos</b>	0.07
<b>TOTAL</b>	<b>0.14</b>

Tabla 7.1: Huella de carbono producida por la realización del Trabajo de Final de Grado



# Capítulo 8

## Presupuesto

### 8.1. Introducción

En el presente capítulo se va a llevar a cabo una descripción de los costes que han implicado el desarrollo del estudio e implementación presentado en este trabajo. En este presupuesto se consideran los gastos correspondientes al salario de los investigadores y docentes implicados, así como de las licencias de software empleado, teniendo en cuenta una estimación del tiempo empleado en cada una de las actividades descritas a lo largo del proyecto.

### 8.2. Costes unitarios

Los costes unitarios tienen en cuenta el precio por hora de cada uno de los programas informáticos empleados, así como el salario del personal involucrado en el desarrollo del proyecto.

#### **Personal implicado**

Cabe tener en cuenta las principales figuras implicadas en el proyecto. Por un lado, un profesor contratado doctor, el tutor del proyecto; por otro lado, un ayudante doctorando, cotutor del proyecto y principal ayuda en la realización de este trabajo. Por último, la autora del trabajo, ingeniera de grado.

- **Ingeniero Senior:** tutor del proyecto y colaboradores del CIEMAT y el BSC. El salario medio anual de un ingeniero aeroespacial senior, según datos proporcionados por empresas como Airbus [41], es de 45669,40€ brutos. Contabilizando un total de 1800 horas trabajadas a lo largo del año, lo cual se corresponde con 25,37 €/h.
- **Ingeniero Junior:** cotutor del proyecto. Su retribución anual aproximada, basada en los datos recogidos en [41], es de 29928,08€, para un total de 1800 horas trabajadas, lo cual corresponde a 16,63 €/h.

- **Ingeniera en formación:** autora del trabajo. La retribución mínima para un ingeniero aeroespacial en prácticas estudiante de la UPV es de 4,3€/h.

### Licencias

En cuanto a las licencias, cabe destacar que se haya el coste unitario dividiendo el coste de la licencia anual entre las horas totales que tiene un año, es decir, 8760 horas. Se han utilizado varios programas para realizar el trabajo cuyos costes son los siguientes:

- **Microsoft Office:** el coste anual de una licencia Microsoft 365 Personal es de 69 €, lo cual se traduce en 0,01€/h.
- **Matlab:** el coste anual de la licencia para el ámbito universitario es de 250€, lo cual establece un coste de 0,03 €/h.
- **LFLAM:** se trata de un software privado que únicamente se puede utilizar en el contexto de un proyecto en colaboración con el CIEMAT.
- **Alya:** se trata también de un software privado que únicamente puede ser utilizado y modificado en el contexto de un proyecto en colaboración con el BSC.
- **ParaView:** software libre

### Electricidad

El coste de la electricidad para la estimación del gasto eléctrico se establece en 0,1€/kWh, con un impuesto eléctrico de un 5 %.

## 8.3. Desglose de costes

Una vez se conocen los costes unitarios, se describe el coste para cada actividad del trabajo llevado a cabo. A partir de una estimación de las horas empleadas en cada parte y de dichos costes unitarios se halla el coste de cada parte.

### Licencias

Se presenta a continuación la contabilización de los gastos relativos al uso de programas informáticos fundamentales para la obtención de los resultados y el desarrollo de documentos y presentaciones relacionados con el trabajo. En la Tabla 8.1 se presenta el desglose de cada programa, sin incluir los programas de libre acceso.

En el caso de MATLAB, se han contabilizado todas las horas empleadas para crear todos los códigos incluidos en los diferentes Anexos necesarios para calcular y tabular, así como el tiempo necesario para postprocesar los resultados. En el caso de PowerPoint, se contabilizan las horas durante las que se

ha usado el programa para crear presentaciones para mostrar el avance a personas conocedoras del proyecto a lo largo de su desarrollo, así como el tiempo empleado para crear la presentación empleada en la defensa del trabajo.

Coste licencias			
Concepto	Coste unitario (€/h)	Tiempo empleado (h)	Coste total (€)
Matlab	0,03	200,00	6,00
PowerPoint	0,01	30,00	0,30
Alya	-	-	-
LFLAM	-	-	-
ParaView	0,00	0,00	0,00
<b>TOTAL</b>			<b>6,30</b>

Tabla 8.1: Costes totales por licencias

### Personal

A continuación se presenta el desglose de gastos relacionados con los salarios de los trabajadores involucrados en la realización de este proyecto, estimando sus horas de trabajo. En la Tabla 8.2 se pueden observar dichos costes.

Coste personal			
Concepto	Coste unitario (€/h)	Tiempo empleado (h)	Coste total (€)
Ingeniera en formación	4,3	550,00	2365,00
Ingeniero Senior Tutor	25,37	60,00	1522,20
Ingeniero Senior CIEMAT	25,37	100,00	2537,00
Ingeniero Senior BSC	25,37	60,00	1522,20
Ingeniero Junior Cotutor	16,63	100,00	1663,00
<b>TOTAL</b>			<b>9609,4</b>

Tabla 8.2: Costes totales por personal

### Transporte

El coste relativo al transporte se considerará nulo, ya que en el contexto de la realización del presente trabajo se han cursado los correspondientes estudios universitarios, por lo que el gasto en transporte se hubiera llevado a cabo igualmente. Además, dada la existencia del *Abono Temporal Jove Gratuito* este gasto ha sido nulo. Por otro lado, las reuniones llevadas a cabo han sido siempre en el mismo lugar de trabajo, y en caso de haber sido necesaria alguna reunión con el Centro de Supercomputación

de Barcelona, se ha llevado a cabo *online*.

### Electricidad

Se muestra en la Tabla 8.3 el desglose correspondiente al gasto eléctrico, teniendo en cuenta el precio e impuesto de electricidad mencionados anteriormente

Coste eléctrico			
Concepto	Gasto unitario (W)	Gasto total (kWh)	Coste total (€)
Ordenador portátil	100,00	50,00	5,25
Aire acondicionado	900,00	180,00	18,90
Luz	50,00	10,00	1,05
<b>TOTAL</b>			25,20

Tabla 8.3: Costes totales por electricidad

### Material

En cuanto al material, se consideran gastos relacionados con material de oficina y el coste de amortización del equipo informático empleado para la realización del trabajo. En cuanto al modelo, se trata de un ordenador portátil MSI Prestige ideapad 330, con un precio de compra de 1200 €. Se considera un tiempo de amortización de 5 años, por lo que el coste correspondiente al tiempo de realización del trabajo es de 160 €. Los cálculos se presentan en la Tabla 8.4.

Coste Material	
Concepto	Coste total (€)
Amortización ordenador	160,00
Material oficina	20,00
<b>TOTAL</b>	<b>180,00</b>

Tabla 8.4: Costes totales por material

## 8.4. Coste total

Por último, como resumen se muestra en la Tabla 8.5 el coste total del proyecto, así como el desglose por cada concepto. Se han tenido en cuenta también los costes indirectos, considerados un 20% respecto a los costes directos, y el IVA, incluido en todos los costes previamente mencionados.

<b>Coste Total</b>	
<b>Concepto</b>	<b>Coste (€)</b>
<b>Licencias</b>	6,30
<b>Personal</b>	9609,40
<b>Electricidad</b>	25,20
<b>Material</b>	180,00
<b>Costes indirectos</b>	1964,18
<b>TOTAL</b>	<b>11785,08</b>

Tabla 8.5: Coste total del proyecto

## 8.5. Beneficio económico

En cuanto al beneficio obtenido por la realización del Trabajo de Fin de Grado, en la industria aeronáutica se puede asumir de, aproximadamente, un 10 % del coste total. Pese a que una correcta estimación de este se debería realizar con un estudio de mercado, se considera que dicho valor es representativo en el sector. De este modo, en la Tabla 8.6 se presenta el beneficio comercial que se estima producto del estudio realizado, teniendo en cuenta también el impuesto de sociedades, correspondiente a un 25 % del beneficio neto.

<b>Coste y beneficio total</b>	
<b>Concepto</b>	<b>Importe (€)</b>
<b>Beneficio comercial</b>	1178,51
<b>Coste total</b>	<b>10606,57</b>

Tabla 8.6: Coste y beneficio total del proyecto



# Bibliografía

- [1] H. Ritchie, M. Roser, and P. Rosado, “CO and Greenhouse Gas Emissions,” *Our World in Data*, 2020. [Online]. Available: <https://ourworldindata.org/co2-and-greenhouse-gas-emissions>
- [2] Organización de las Naciones Unidas, “Objetivo 7: Garantizar el acceso a una energía asequible, segura, sostenible y moderna,” 7, visitada el 09/07/2023. [Online]. Available: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/energy/>
- [3] —, “Objetivo 13: Adoptar medidas urgentes para combatir el cambio climático y sus efectos,” 7, visitada el 09/07/2023. [Online]. Available: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/climate-change-2/>
- [4] J. Xi, G. Yang, J. Cai, and Z. Gu, “A Review of Recent Research Results on Soot: The Formation of a Kind of Carbon-Based Material in Flames,” 5 2021.
- [5] A. Fuentes, R. Henríquez, F. Nmira, F. Liu, and J. L. Consalvi, “Experimental and numerical study of the effects of the oxygen index on the radiation characteristics of laminar coflow diffusion flames,” *Combustion and Flame*, vol. 160, no. 4, pp. 786–795, 4 2013.
- [6] C. Lou, Z. Li, Y. Zhang, and B. M. Kumfer, “Soot formation characteristics in laminar coflow flames with application to oxy-combustion,” *Combustion and Flame*, vol. 227, pp. 371–383, 5 2021.
- [7] F. Liu, X. He, X. Ma, Q. Zhang, M. J. Thomson, H. Guo, G. J. Smallwood, S. Shuai, and J. Wang, “An experimental and numerical study of the effects of dimethyl ether addition to fuel on polycyclic aromatic hydrocarbon and soot formation in laminar coflow ethylene/air diffusion flames,” *Combustion and Flame*, vol. 158, no. 3, pp. 547–563, 3 2011.
- [8] L. Zimmer, “ENGENHARIA MECÂNICA NUMERICAL STUDY OF SOOT FORMATION IN LAMINAR ETHYLENE DIFFUSION FLAMES,” MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Tech. Rep.

- [9] T. Zhang, L. Zhao, M. R. Kholghy, S. Thion, and M. J. Thomson, “Detailed investigation of soot formation from jet fuel in a diffusion flame with comprehensive and hybrid chemical mechanisms,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 2, pp. 2037–2045, 2019.
- [10] “Turborreactor,” 4 2023, visitada el 12/06/2023. [Online]. Available: <https://es.wikipedia.org/wiki/Turborreactor>
- [11] “Turbinas de gas con quemadores de bajas emisiones,” 4 2013, visitada el 12/06/2023. [Online]. Available: <https://www.manufactura-latam.com/es/noticias/turbinas-de-gas-con-quemadores-de-bajas-emisiones>
- [12] P. Kiameh, *Power generation handbook: selection, applications, operation, and maintenance*. McGraw-Hill Professional, 2003.
- [13] REAL ACADEMIA DE LA LENGUA, “Diccionario de la lengua española,” visitada el 04/06/2023. [Online]. Available: <https://dle.rae.es>
- [14] “Premixed Versus Non-Premixed Flames,” *Duty Safety Science*. [Online]. Available: <https://dustsafetyscience.com/premixed-vs-non-premixed-flames/>
- [15] E. Javier Pérez Sánchez, F. Payri González, and A. Ricardo Novella Rosa Valencia, “Application of a flamelet-based combustion model to diesel-like reacting sprays,” Tech. Rep., 2018.
- [16] F. Popescu and I. Ionel, “Anthropogenic Air Pollution Sources,” in *Air Quality*. Sciyo, 8 2010.
- [17] S. S. Rashwan, M. A. Nemitallah, and M. A. Habib, “Review on Premixed Combustion Technology: Stability, Emission Control, Applications, and Numerical Case Study,” pp. 9981–10 014, 12 2016.
- [18] E. T. S. I. Aeronáuticos and A. Director, “DEPARTAMENTO DE MOTOPROPULSION Y TERMOFLUIDODINAMICA,” Tech. Rep.
- [19] J. F. Winklinger, R. Novella, and R. Valencia, “Implementation of a Combustion Model based on the Flamelet Concept and its Application to turbulent reactive Sprays Doctoral Thesis,” Tech. Rep., 2014.
- [20] T. Poinso and D. Veynatnte, *Theoretical and Numerical Combustion*, second edition ed. Edwards, 2005.
- [21] Bilger R.W., “On reduced mechanisms for methaneair combustion in nonpremixed flames,” *Combustion and Flame*, vol. 80, no. 2, pp. 135–149, 5 1990.



- [22] S. Ruiz Gallardo, “PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA MODELAMIENTO NUMÉRICO DE LA FORMACIÓN DE HOLLÍN EN LLAMAS,” Tech. Rep.
- [23] N. Slavinskaya, A. Mirzayeva, R. Whitside, J. H. Starke, M. Abbasi, M. Auyelkhanzy, and V. Chernov, “A modelling study of acetylene oxidation and pyrolysis,” pp. 25–42, 12 2019.
- [24] Y. Wang, A. Raj, and S. H. Chung, “Soot modeling of counterflow diffusion flames of ethylene-based binary mixture fuels,” *Combustion and Flame*, vol. 162, no. 3, pp. 586–596, 3 2015.
- [25] René Sebastian Valencia Ramírez, “Desarrollo de modelos de formación de hollín para la identificación vía modelamiento numérico de las principales especies químicas precursoras de hollín en flujos turbulentos reactivos,” Tech. Rep.
- [26] K.O.Johansson, M.P.Head-Gordon, P.E. Schrader, K.R.Wilson, and H.A.Michelsen, “Resonance-stabilized hydrocarbon-radical chain reactions may explain soot inception and growth,” *Science*, vol. 361, pp. 997–1000, 9 2018.
- [27] Q. Zhang, “Detailed Modeling of Soot Formation/Oxidation in Laminar Coflow Diffusion Flames,” Tech. Rep.
- [28] L. Pachano, C. Xu, J. M. García-Oliver, J. M. Pastor, R. Novella, and P. Kundu, “A two-equation soot-in-flamelet modeling approach applied under Spray A conditions Author names and affiliations Corresponding author,” Tech. Rep.
- [29] P. Rodrigues, B. Franzelli, R. Vicquelin, O. Gicquel, and N. Darabiha, “Coupling an LES approach and a soot sectional model for the study of sooting turbulent non-premixed flames,” *Combustion and Flame*, pp. 477–499, 2018. [Online]. Available: <https://hal.science/hal-01718624>
- [30] A. Kalbhor, D. Mira, and J. van Oijen, “A computationally efficient approach for soot modeling with discrete sectional method and FGM chemistry,” *Combustion and Flame*, vol. 255, p. 112868, 9 2023. [Online]. Available: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010218023002493>
- [31] K. M. Leung, R. P. Lindstedt, and W. P. Jones, “A Simplified Reaction Mechanism for Soot Formation in Nonpremixed Flames,” Tech. Rep., 1991.
- [32] M. Fairweather, W. P. Jones, and R. P. Lindstedt, “Predictions of Radiative Transfer from a Turbulent Reacting Jet in a Cross-Wind,” Tech. Rep., 1992.
- [33] G. J. Smallwood, F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood, and O. L. G. Ulder, “Effects of gas and soot radiation on soot formation in a co ow laminar ethylene diffusion ame EEects of gas and

- soot radiation on soot formation in a coow laminar ethylene diusion name,” Tech. Rep., 2002. [Online]. Available: [www.elsevier.com/locate/jqsrt](http://www.elsevier.com/locate/jqsrt)
- [34] b. C. P Fenimore and G. W. Jones, “Oxidation of Soot by OH Radicals 593 Oxidation of Soot by Hydroxyl Radicals,” Tech. Rep. 2, 1962. [Online]. Available: <https://pubs.acs.org/sharingguidelines>
- [35] M. Rouse, “Computational Fluid Dynamics,” 10 2016, visitada el 19/06/2023. [Online]. Available: <https://www.techopedia.com/definition/18247/computational-fluid-dynamics-cfd>
- [36] L. M. Lara, “Estudio mediante CFD de la estela del DrivAer,” Tech. Rep.
- [37] K. Gleason, F. Carbone, and A. Gomez, “PAHs controlling soot nucleation in 0.101—0.811MPa ethylene counterflow diffusion flames,” *Combustion and Flame*, vol. 227, pp. 384–395, 5 2021.
- [38] J. Benajes, J. M. García-Oliver, J. M. Pastor, I. Olmeda, A. Both, and D. Mira, “Analysis of local extinction of a n-heptane spray flame using large-eddy simulation with tabulated chemistry,” *Combustion and Flame*, vol. 235, 1 2022.
- [39] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante, “Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow,” *Combustion and Flame*, vol. 152, no. 3, pp. 415–432, 2 2008.
- [40] RADsite, “Carbon Footprint,” visitada el 15/07/2023. [Online]. Available: <https://calculator.carbonfootprint.com/calculator.aspx?lang=es&tab=2>
- [41] “Salario medio 2023 Ingeniero Aeronáutico en España,” visitada el 15/07/2023. [Online]. Available: [https://www.tucursogratis.net/cuanto-gana-un-ingeniero-aeronautico/#Cuanto\\_gana\\_un\\_ingeniero\\_aeronautico\\_en\\_Espana\\_2023](https://www.tucursogratis.net/cuanto-gana-un-ingeniero-aeronautico/#Cuanto_gana_un_ingeniero_aeronautico_en_Espana_2023)

## Apéndice A

### Código 1 Postprocesado

Se presenta a continuación el *script* de la función *lectura\_ficheros*. Esta función convierte un archivo *.out* en una serie de matrices, valores y cadenas de caracteres *output* que serán empleados en otro código de postprocesado.

```
function [permanente,block2,especies,block4,block5,a_found,t_fuel,
        nombre_comb,submodel]=lectura_ficheros(archivo_analisis)

especie_steady_name={'C2H4' 'O2' 'N2' 'CO2' 'H2O' 'CO' 'CH2O' 'OH' '
        C2H2' 'A4'}; %Especies a analizar
especie_inert_name= especie_steady_name;
fid_std=fopen(archivo_analisis); %lectura del archivo del directorio

%% BUCLE PRINCIPAL DE RESOLUCION
        linea_std=fgets(fid_std);
        %Se busca el modelo de hollin empleado, si no es ninguno se
            nombrara como 0
        while ~strncmp('/IRAD',linea_std,length('/IRAD'))
            linea_std=fgets(fid_std);
        end
        linea_std=fgets(fid_std);
        if linea_std(1)=='/'
            submodel='0';
        else
            [~,submodel]=strtok(linea_std);
            submodel=strrep(submodel,' ','');
        end
    end
```

```

        submodel=submodel(1);
        %submodel=str2num(submodel);
    end

    %Se buscan los datos necesarios para guardar el nombre concreto del
    %caso
    while ~strncmp('TFUE',linea_std,length('TFUE'))
        linea_std=fgets(fid_std);
    end
    [~,t_fuel]=strtok(linea_std);
    t_fuel=strrep(t_fuel,' ','');

    while ~strncmp('FUEL',linea_std,length('FUEL'))
        linea_std=fgets(fid_std);
    end
    [~,nombre_comb]=strtok(linea_std);
    nombre_comb=strtok(nombre_comb);
    nombre_comb=strrep(nombre_comb,' ','');

    % Se busca la cadena de caracteres que indica el inicio de la
    % solucion estabilizada, LA SOLUCION CONVERGIDA: LA SEGUNDA
    while ~strncmp(' //////////////// continuing to new problem
    ////////////////',linea_std,length(' //////////////// continuing
    to new problem ////////////////'))
        linea_std=fgets(fid_std);
    end

    while ~strncmp(' TWOPNT: Final solution:',linea_std,length('
    TWOPNT: Final solution:'))
        linea_std=fgets(fid_std);
    end
    linea_a=fgets(fid_std);

    %Posicionamos en la primera tanda de datos

```

```
while ~strncmp('#x, cm',linea_std,length('#x, cm'))
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Se guarda en una matriz los datos de la primera tanda
permanente=[];
linea_std=fgets(fid_std);
while length(linea_std)~=1
    permanente=[permanente;str2num(linea_std)];
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Posicionamos en la segunda tanda de datos
while ~strncmp('#x, cm',linea_std,length('#x, cm'))
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Se guarda en una matriz los datos de la segunda tanda
block2=[];
linea_std=fgets(fid_std);
while length(linea_std)~=1
    block2=[block2;str2num(linea_std)];
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Posicionamos en la tercera tanda de datos
while ~strncmp(' #x(cm)',linea_std,length(' #x(cm)'))
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Se guarda en una matriz los datos de la tercera tanda
especies=[];
linea_std=fgets(fid_std);
```

```
while length(linea_std)~=1
    especies=[especies;str2num(linea_std)];
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Posicionamos en la cuarta tanda de datos
while ~strncmp(' #x(cm)',linea_std,length(' #x(cm)'))
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%Se guarda en una matriz los datos de la cuarta tanda
block4=[];
linea_std=fgets(fid_std);
while length(linea_std)~=1
    block4=[block4;str2num(linea_std)];
    linea_std=fgets(fid_std);
end

%La ultima tanda solo existe si se esta calculando con un
%submodelo de hollin
if submodel=='0'
    block5=[];
else
    %Posicionamos en la ultima tanda de datos
    while ~strncmp(' #x(cm)',linea_std,length(' #x(cm)'))
        linea_std=fgets(fid_std);
    end

    %Se guarda en una matriz los datos de la ultima tanda
    block5=[];
    linea_std=fgets(fid_std);
    while length(linea_std)~=1
        block5=[block5;str2num(linea_std)];
```

---

```
        linea_std=fgets(fid_std);
    end

    end

    linea_std=fgets(fid_std);

    %Se anota el SR del caso en concreto
    if length(linea_a)==1 %Para leer casos en los que se impone
        velocidad, no SR
        while ~strncmp(' aglob = ',linea_std,6)
            linea_std=fgets(fid_std);
        end
        linea_a=linea_std;
        [~,linea_a]=strtok(linea_a, '=');
    else
        [~,linea_a]=strtok(linea_a, ':');
    end

    [~,linea_a]=strtok(linea_a);
    linea_a=strtok(linea_a);
    a_found=str2num(linea_a);

    fclose(fid_std);

end
```





## Apéndice B

### Código 2 Postprocesado

El siguiente código hace referencia al *script* que, a partir de un archivo *.out* de LFLAM genera una estructura *.mat*, haciendo uso de la función descrita en el Anexo A.

```
caso = input(' Introduce the name.out of the case to be analyzed: ','s'
);

especie_steady_name={'C2H4' 'O2' 'N2' 'CO2' 'H2O' 'CO' 'CH2O' 'OH' '
    C2H2' 'A4'}; %Especies a analizar
[permanente,block2,especies,block4,block5,a_found,t_fuel,nombre_comb,
    submodel]=lectura_ficheros(caso);
%% Tenemos permanente, block2 y especies, construimos las matrices de
    datos

    x_read = permanente(:,1); %Reune las X
    x_min = x_read(1);%valor min
    x_max = x_read(end);%valor max
    T_max=max(block2(:,6)); %Busca la temperatura maxima
    k=find(block2(:,6)==T_max); %Busca la posicion de x donde esta esa
        temperatura maxima
    x_mid=x_read(k(1));
    vect_inicio=find(block2(:,6)>=1.1*block2(1,6)); %Busca el primer
        punto donde la temperatura es 1.1*Tinicial, considerando este un
        punto cercano a la llama y a partir del cual se refinara
    inicio=vect_inicio(1);
```

```

vect_fin=find(block2(:,6)>=1.1*block2(1,6)); %Lo mismo con el final
fin=vect_fin(end);
%Se crea el vector X con mucha resolucio en la zona de interaccion
X =[transpose(linspace(x_read(1),x_read(inicio),15)); transpose(
    linspace(x_read(inicio),x_read(fin),1000)); transpose(linspace(
    x_read(fin),x_read(end),15))];
matriz_especie=zeros(length(X),length(especie_steady_name));

% Se interpolan los resultados en el vector de x predefinido
[~,iuni,~] = unique(permanente(:,1));
permanente = permanente(iuni,:);
mixf_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,2),X);
chi_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,3),X);
Yc_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,4),X);
Ycdot_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,5),X);

%Se repite para la segunda tanda
[~,iuni,~] = unique(block2(:,1));
block2 = block2(iuni,:);
F_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,2),X);
u_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,3),X);
G_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,4),X);
vy_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,5),X);
temp_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,6),X);
rho_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,7),X);
H_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,8),X);

%Se repite para la tercera tanda, donde se encuentran las especies
especie_perm = zeros(length(X),length(especie_steady_name));
for index = 1:length(especie_steady_name)
    especie_perm(:,index) = interp1(especies(:,1),especies(:,index
    +3),X);
end
Zb_perm = interp1(especies(:,1),especies(:,2),X);

```

```
Zt_perm = interp1(especies(:,1),especies(:,3),X);

%Se repite para la cuarta tanda
[~,iuni,~] = unique(block4(:,1));
block4 = block4(iuni,:);
cp1_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,4),X);
cp2_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,5),X);
cp3_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,6),X);
cp4_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,7),X);
cp5_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,8),X);
cp6_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,9),X);
MW_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,10),X);
visc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,11),X);
conduc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,12),X);
wYc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,13),X);
wYcYc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,14),X);

%Se repite para la ultima tanda si esta existe
if submodel=='0'
else
[~,iuni,~] = unique(block4(:,1));
block5 = block5(iuni,:);
As_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,4),X);
Ys_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,5),X);
Ns_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,6),X);
Qnuc_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,7),X);
Qsg_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,8),X);
Qox02_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,9),X);
Qox0H_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,10),X);
Qox0_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,11),X);
Qox_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,12),X);
Qnnuc_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,13),X);
Qnag_Yc_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,14),X);
end
```

```
%% Escritura de la estructura de la flamelet
flameletDF.type = 'steady';
flameletDF.X = X;
flameletDF.SR=a_found; %Se guarda el Strain Rate de la llama
%Primera tanda
flameletDF.mixf=mixf_perm;
flameletDF.Yc=Yc_perm;
flameletDF.chi=chi_perm;
flameletDF.Ycdot=Ycdot_perm;
%Segunda tanda
flameletDF.F=F_perm;
flameletDF.u=u_perm;
flameletDF.G=G_perm;
flameletDF.vy=vy_perm;
flameletDF.T=temp_perm;
flameletDF.rho=rho_perm;
flameletDF.H=H_perm;

%Tercera tanda
flameletDF.species_name=especie_steady_name;
flameletDF.species=especie_perm;
for k=1:length(especie_steady_name)
flameletDF.(string(especie_steady_name(k)))=especie_perm(:,k);
end
flameletDF.Zb=Zb_perm;
flameletDF.Zt=Zt_perm;

%Cuarta tanda
flameletDF.cp1=cp1_perm;
flameletDF.cp2=cp2_perm;
flameletDF.cp3=cp3_perm;
flameletDF.cp4=cp4_perm;
flameletDF.cp5=cp5_perm;
```

```
flameletDF.cp6=cp6_perm;
flameletDF.MW=MW_perm;
flameletDF.visc=visc_perm;
flameletDF.conduc=conduc_perm;
flameletDF.wYc=wYc_perm;
flameletDF.wYcYc=wYcYc_perm;

if submodel=='0'
else
%Ultima tanda
flameletDF.As=As_perm;
flameletDF.Ys=Ys_perm;
flameletDF.Ns=Ns_perm;
flameletDF.Qnuc=Qnuc_perm;
flameletDF.Qsg=Qsg_perm;
flameletDF.QoxO2=QoxO2_perm;
flameletDF.QoxOH=QoxOH_perm;
flameletDF.QoxO=QoxO_perm;
flameletDF.Qox=Qox_perm;
flameletDF.Qnnuc=Qnnuc_perm;
flameletDF.QnagYc=Qnag_Yc_perm;
end

flameletDF.submodel=submodel;

fid_input=fopen(caso,'r');
    dirOut=fgets(fid_input);

nomb_SR=strtok(num2str(a_found),'.');
nomb_tfuel=strtok(t_fuel, '.');
nombre_fichero=strcat('DFsteady_XLFLAM_',nombre_comb,'_',nomb_tfuel,'_'
    ,nomb_SR,'_sub',submodel,'.mat');
save(nombre_fichero,'flameletDF','-v7.3');
```

```
fprintf('Proceso finalizado, estructura guardada')
```

## Apéndice C

### Código 3 Postprocesado

El siguiente código representa la creación de una única estructura de MATLAB (*.mat*) a partir de una ubicación de carpetas. Todas estas tienen que tener un archivo *.out* dentro, y cada columna del archivo *.mat* será una carpeta, por lo general un SR. Esta estructura de código ha sido creada en base a los Anexos A y B.

```
carpeta = input(' Introduce the name of the folder where the cases are  
or pwd if it is the current folder: ','s');  
  
especie_steady_name={'C2H4' 'O2' 'N2' 'CO2' 'H2O' 'CO' 'CH2O' 'OH' '  
C2H2' 'A4'}; %Estas son las especies a analizar  
especie_inert_name= especie_steady_name;  
  
%Definicion de matrices que se usaran despues  
mixf_mat=[]; chi_mat=[]; Yc_mat=[]; Ycdot_mat=[]; F_mat=[]; u_mat=[];  
G_mat=[]; vy_mat=[]; temp_mat=[]; rho_mat=[]; H_mat=[];  
especie_mat=[]; Zb_mat=[]; Zt_mat=[]; YS_mat=[]; NS_mat=[];  
cp1_mat=[]; cp2_mat=[]; cp3_mat=[]; cp4_mat=[]; cp5_mat=[]; cp6_mat  
=[]; MW_mat=[]; visc_mat=[]; conduc_mat=[];  
wYc_mat=[]; wYcYc_mat=[]; As_mat=[]; Qnuc_mat=[]; Qsg_mat=[];  
QoxO2_mat=[]; QoxOH_mat=[]; QoxO_mat=[]; Qox_mat=[]; Qnnuc_mat=[];  
Qnag_mat=[];  
SR_mat=[]; submodel_mat=[];  
  
%Se ve lo que hay dentro del directorio
```

```
num=dir(eval(carpeta));

%Cuenta cuantas de ellas son carpetas, no archivos
carp=[]; %los dos primeros son puntos siempre
for k=1:size(num,1)
    carp=[carp, num(k).isdir];
end

carpeti=find(carp); %dice las posiciones del vector carpeta en las que
    es 0 (donde estan las carpetas)

for l=carpeti(3):carpeti(end) %los dos primeros son puntos siempre

    cd(num(l).name) %Entra dentro de la carpeta

    act=dir(pwd); %Ve que tiene dentro

%Busca donde esta el .out
archi=[]; %los dos primeros son puntos siempre
for j=1:size(act,1)
    archi=[archi, contains(act(j).name,'out')];
end

for i=3:size(act,1) %de nuevo, los dos primeros son puntos
    if archi(i)==1 %busca donde esta el .out, donde se han guardado
        los resultados
            archivo=act(i).name;
        end
    end

%end :este end esta al final para que haga el proceso en todos los
casos

[permanente,block2,especies,block4,block5,a_found,t_fuel,nombre_comb,
submodel]=lectura_ficheros(caso); %Se sacan las matrices de datos
para el caso en concreto
```



```
%%Se tienen permanente, block2, especies, block4 y block5 se
    construyen las matrices de datos

x_read = permanente(:,1); %Recoge las X
x_min = x_read(1); %valor min
x_max = x_read(end); %valor max
T_max=max(block2(:,6)); %Busca la temperatura maxima
k=find(block2(:,6)==T_max); %Busca la posicion de x donde esta esa
    temperatura maxima
x_mid=x_read(k(1));

%Se agrega esto para que el refinamiento no falle con la extincion
    de llama
if T_max<500
    inicio=1;
    fin=size(block2,1);
else
    vect_inicio=find(block2(:,6)>=1.1*block2(1,6)); %Busca el
        primer punto donde la temperatura es 1.1*Tinicial,
        considerando este un punto cercano a la llama y a partir del
        cual se refinara
    vect_fin=find(block2(:,6)>=1.1*block2(1,6)); %Lo mismo con el
        final
    inicio=vect_inicio(1);
    fin=vect_fin(end);
end

%vector X con mucha resolucioin en la zona de interaccion
X =[transpose(linspace(x_read(1),x_read(inicio),15)); transpose(
    linspace(x_read(inicio),x_read(fin),1000)); transpose(linspace(
    x_read(fin),x_read(end),15))];
matriz_especie=zeros(length(X),length(especie_steady_name)); %Se
    crea la matriz donde se guardaran las especies
```

```

% Se interpolan los resultados en el vector de X predefinido
[~,iuni,~] = unique(permanente(:,1));
permanente = permanente(iuni,:);
mixf_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,2),X);
chi_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,3),X);
Yc_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,4),X);
Ycdot_perm=interp1(permanente(:,1),permanente(:,5),X);

%DE LA TANDA 2
[~,iuni,~] = unique(block2(:,1));
block2 = block2(iuni,:);
F_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,2),X);
u_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,3),X);
G_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,4),X);
vy_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,5),X);
temp_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,6),X);
rho_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,7),X);
H_perm = interp1(block2(:,1),block2(:,8),X);

%DE LA TERCERA TANDA
especie_perm = zeros(length(X),length(especie_steady_name));
for index = 1:length(especie_steady_name)
    especie_perm(:,index) = interp1(especies(:,1),especies(:,index
        +3),X);
end
Zb_perm = interp1(especies(:,1),especies(:,2),X);
Zt_perm = interp1(especies(:,1),especies(:,3),X);

%DE LA TANDA 4
[~,iuni,~] = unique(block4(:,1));
block4 = block4(iuni,:);
cp1_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,4),X);
cp2_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,5),X);

```

```

cp3_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,6),X);
cp4_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,7),X);
cp5_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,8),X);
cp6_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,9),X);
MW_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,10),X);
visc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,11),X);
conduc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,12),X);
wYc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,13),X);
wYcYc_perm = interp1(block4(:,1),block4(:,14),X);

```

### %DE LA TANDA 5

```

[~,iuni,~] = unique(block4(:,1));
block5 = block5(iuni,:);
As_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,4),X);
Ys_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,5),X);
Ns_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,6),X);
Qnuc_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,7),X);
Qsg_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,8),X);
Qox02_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,9),X);
Qox0H_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,10),X);
Qox0_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,11),X);
Qox_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,12),X);
Qnnuc_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,13),X);
Qnag_Yc_perm = interp1(block5(:,1),block5(:,14),X);

```

### %Se crean las matrices de todos los casos resueltos hasta el momento

```

mixf_mat=[mixf_mat mixf_perm];
chi_mat=[chi_mat chi_perm];
Yc_mat=[Yc_mat Yc_perm];
Ycdot_mat=[Ycdot_mat Ycdot_perm];
F_mat=[F_mat F_perm];
u_mat=[u_mat u_perm];
G_mat=[G_mat G_perm];
vy_mat=[vy_mat vy_perm];

```

```
temp_mat=[temp_mat temp_perm];
rho_mat=[rho_mat rho_perm];
H_mat=[H_mat H_perm];
especie_mat(:,1-2,:)=especie_perm;
Zb_mat=[Zb_mat Zb_perm];
Zt_mat=[Zt_mat Zt_perm];
YS_mat=[YS_mat Ys_perm];
NS_mat=[NS_mat Ns_perm];
cp1_mat=[cp1_mat cp1_perm];
cp2_mat=[cp2_mat cp2_perm];
cp3_mat=[cp3_mat cp3_perm];
cp4_mat=[cp4_mat cp4_perm];
cp5_mat=[cp5_mat cp5_perm];
cp6_mat=[cp6_mat cp6_perm];
MW_mat=[MW_mat MW_perm];
visc_mat=[visc_mat visc_perm];
conduc_mat=[conduc_mat conduc_perm];
wYc_mat=[wYc_mat wYc_perm];
wYcYc_mat=[wYcYc_mat wYcYc_perm];
Qnuc_mat=[Qnuc_mat Qnuc_perm];
Qsg_mat=[Qsg_mat Qsg_perm];
QoxO2_mat=[QoxO2_mat QoxO2_perm];
QoxOH_mat=[QoxOH_mat QoxOH_perm];
QoxO_mat=[QoxO_mat QoxO_perm];
SR_mat=[SR_mat a_found];
submodel_mat=[submodel_mat submodel];

cd .. %para volver a la carpeta principal e ir al siguiente caso
end

%% Escritura de la estructura de la flamelet una vez guardados los
    datos
flameletDF.type = 'steady';
flameletDF.X = X;
```

```
flameletDF.SR=SR_mat;

%Primera tanda
flameletDF.mixf=mixf_mat;
flameletDF.Yc=Yc_mat;
flameletDF.chi=chi_mat;
flameletDF.Ycdot=Ycdot_mat;

%Segunda tanda
flameletDF.F=F_mat;
flameletDF.u=u_mat;
flameletDF.G=G_mat;
flameletDF.vy=vy_mat;
flameletDF.T=temp_mat;
flameletDF.rho=rho_mat;
flameletDF.H=H_mat;

%Tercera tanda
flameletDF.species_name=especie_steady_name;
flameletDF.species=especie_mat;
for k=1:length(especie_steady_name)
flameletDF.(string(especie_steady_name(k)))=especie_mat(:, :, k);
end
flameletDF.Zb=Zb_mat;
flameletDF.Zt=Zt_mat;

%Cuarta tanda
flameletDF.cp1=cp1_mat;
flameletDF.cp2=cp2_mat;
flameletDF.cp3=cp3_mat;
flameletDF.cp4=cp4_mat;
flameletDF.cp5=cp5_mat;
flameletDF.cp6=cp6_mat;
flameletDF.MW=MW_mat;
```

```
flameletDF.visc=visc_mat;
flameletDF.conduc=conduc_mat;
flameletDF.wYc=wYc_mat;
flameletDF.wYcYc=wYcYc_mat;

%Ultima tanda
flameletDF.As=As_mat;
flameletDF.YS=YS_mat;
flameletDF.NS=NS_mat;
flameletDF.Qnuc=Qnuc_mat;
flameletDF.Qsg=Qsg_mat;
flameletDF.QoxO2=QoxO2_mat;
flameletDF.QoxOH=QoxOH_mat;
flameletDF.QoxO=QoxO_mat;
flameletDF.Qox=Qox_mat;
flameletDF.Qnnuc=Qnnuc_mat;
flameletDF.QnagYc=Qnag_Yc_mat;
flameletDF.submodel=submodel_mat;

nomb_SR=strtok(num2str(a_found),'.');
nomb_tfuel=strtok(t_fuel, '.');
nombre_fichero=strcat('DFsteady_XLFLAM_',nombre_comb, '_',nomb_tfuel, '.
    mat');
save(nombre_fichero, 'flameletDF', '-v7.3');

fprintf('Proceso finalizado, estructura guardada')
```

## Apéndice D

### *Script* de graficado

Se presenta a continuación el código creado para poder graficar de forma fácil y óptima cualquier gráfica de los datos de LFLAM importados como estructura *.mat* (el resultado de los Anexos previos), así como su comparación con datos experimentales si estos existen.

```
% DFsteady_XLFLAM_C2H4_298_101.mat
% Gleason_exp.mat
clc; clear; close all;
especie_steady_name={'C2H4' 'O2' 'N2' 'CO2' 'H2O' 'CO' 'CH2O' 'OH' '
    C2H2' 'A4'};
caso = input(' Introduce the name and extension of the case to be
    analyzed: ','s');
load(caso)
tmax=max(flameletDF.T);

%Para la comparativa experimental
exp= input('Are there experimental data? Enter yes or no: ','s');
if length(exp)==2 %Para que no de error en ingles
    exp='noo';
end
if exp=='yes'
datosexp= input('Enter the name and extension where the experimental
    data is stored: ','s');
load(datosexp)
[nombrecaso,~]=strtok(datosexp, '.');
end
```

```
%Variables de analisis
variable=input('What is the variable to graph? \nOptions: mixf, chi, Yc
, Ycdot, F, u, G, vy, T, rho, H, Zb, Zt, YS, NS, species (all of
them) or some in particular.\nWrite all the ones you need separated
by commas:', 's');
variable=split(string(variable), ',');
mezcla= input('Do you want to graph something with the temperature?.
Introduce yes or no: ', 's');
if length(mezcla)==2 %Para que no de error en ingles
    mezcla='noo';
end

if mezcla=='yes'
    datomezcla=input('Which variables, separated by a comma, do you
want to analyze? ', 's');
    datomezcla=split(string(datomezcla), ',');
else
    datomezcla=[];
end

%Ploteamos
figure
total=[variable; datomezcla];
for i=1:length(total)

    %Decidimos de cuanto va a ser el subplot
    if length(total)<4
        m=1;n=length(total);
    elseif length(total)>3
        n=3;
        m=ceil(length(total)/3);
    end
end
```



```
subplot(m,n,i)
if i>length(variable) %analizamos lo que queremos graficar con la
    temperatura
    y1=flameletDF.T;
    y2=flameletDF.(total(i));
    yyaxis left
    plot(flameletDF.X,y1)
    xlabel('x (cm)')
    ylabel('Temperature (K)')
    yyaxis right
    plot(flameletDF.X,y2)
%     legend({'T (K)',total(i)},'Location','northeast')
else
%if exist(MPa0101_2013K.(variable(i))(:,1))==1
    if exp=='yes'
        if isfield(MPa0101_2013K,total(i))==1
            y1=flameletDF.(total(i));
            x2=MPa0101_2013K.(total(i))(:,1);
            y2=MPa0101_2013K.(total(i))(:,2);
            p=plot(flameletDF.X,y1,x2/10+0.35,y2);
            xlabel('x (cm)')
%         ylabel(variable(i))
            p(1).LineWidth = 2;
            p(2).Marker = 'o';
            legend({'Teorico','Experimental'},'Location','northeast')
            end
        else
            y=flameletDF.(total(i));
            plot(flameletDF.X,y)
            xlabel('x (cm)')
%         ylabel(variable(i))

            end
end
end
```

```
switch total(i)
  case 'mixf'
    ylabel('mixf')
  case 'chi'
    ylabel('chi')
  case 'Yc'
    ylabel('Yc')
  case 'Ycdot'
    ylabel('Ycdot')
  case 'F'
    ylabel('F')
  case 'u'
    ylabel('Velocity (m/s)')
  case 'G'
    ylabel('G')
  case 'vy'
    ylabel('v/y (1/s)')
  case 'T'
    ylabel('Temperature (K)')
  case 'rho'
    ylabel('Density (kg/m3)')
  case 'H'
    ylabel('H')
  case 'Zb'
    ylabel('Zb')
  case 'Zt'
    ylabel('Zt')
  case 'YS'
    ylabel('YS')
  case 'NS'
    ylabel('NS')
  otherwise ylabel(total(i))
end
```

hold on

end



## Apéndice E

# Código cálculo rama *Upper*

En este anexo se muestra el código empleado para generar los archivos *bash* necesarios para ejecutar el correcto cálculo de la rama superior de la Figura 3.2.

```
%Start script on the main folder
clear all;

bool_steady = true;

bool_upper = true;
bool_lower = false;
bool_middle = false;
bool_middle2 = false;

bool_linux = true;

home = '/media/ivolra/data/ivolra/CMT/Cristina/Tabla1_Lam_Leo/No_Soot/'
;
%SR_vector is a vector with desired SR values
%It should NOT contain the ref case
%SR_vector = load ([home '\SRvector']);
SR_vector = load ([home '/SRvector']);

%% Ref data for Upper
%ref_folder_rel = '/SR00001';
% SR_vector = [16000, 20000, 25000, 30000, 36000];
```

```
ref_folder_init_rel = '/init_SR00001';
ref_folder_rel = '/SR00001';
istart = 1;
iend = length(SR_vector);

controlfile = 'control.C2H4';
inputfile = 'C2H4.inp';

%% Change folder character between linux/windows
% Scripts files are only written in linux version
if(bool_linux)
    slash = '/';
else
    slash = '\\';
end

%% Open script file
if (bool_steady)
    out_folder_script = ([home slash 'Steady' ]);
    if(bool_upper)
        out_folder = ([home slash 'Steady' slash 'Upper' ]);
    elseif (bool_lower)
        out_folder = ([home slash 'Steady' slash 'Lower' ]);
    elseif (bool_middle)
        out_folder = ([home slash 'Steady' slash 'Middle' ]);
    elseif (bool_middle2)
        out_folder = ([home slash 'Steady' slash 'Middle2']);
    end
else
    out_folder_script = ([home slash 'Unsteady' slash]);
    out_folder = ([home slash 'Unsteady' slash 'Ignition' slash]);
end

cd (out_folder);
```

```
ref_folder = ([out_folder ref_folder_rel]);

if(bool_steady)
    if(bool_upper)
        fid_write_script = fopen([out_folder_script slash '02
            a_script_run_Upper-multi_all.sh'], 'w');
        fprintf(fid_write_script, 'cd Upper\n');
        fprintf(fid_write_script, 'cd %s; rm *.save; ln -s ../%s/C2H4.
            save RESTART.save; XLFLAM_230428.GFORTRAN.02 < control.C2H4
            &> log; BACK_PID=$!; wait $BACK_PID\n', ref_folder_rel(2:end)
            , ref_folder_init_rel(2:end));

    elseif(bool_lower)
        fid_write_script = fopen([out_folder_script slash '03
            _script_run_Lower_all'], 'w');
        fprintf(fid_write_script, 'cd Lower\n');
        fprintf(fid_write_script, 'cd %s; rm *.save; ln -s ../../Inert/
            Inert/C2H4.save RESTART.save; XLFLAM_230428.GFORTRAN.02 <
            control.C2H4\n', ref_folder_rel(2:end));

    end
else
    fid_write_script = fopen([out_folder_script slash '01
        a_script_Ignition-multi_all'], 'w');
    fprintf(fid_write_script, 'cd Ignition\n\n');
    fprintf(fid_write_script, 'cd %s; rm *.flm; rm *.save; rm *.out; rm
        *.dat; rm oppdif.rcvr; rm viewfile; ln -s ../../../Steady/Inert/
        Inert/C2H4.save INERT.save; ln -s ../../../Steady/Upper/%s/C2H4.
        save UPPER.save; XLFLAM_230428.GFORTRAN.02 < control.C2H4\n\n',
        ref_folder_rel(2:end), ref_folder_rel(2:end));

end

%% Start batch processing
for i = istart:iend
    if(i>istart)
```

```

        SR_text_prev = SR_text;
    end
    % Compose string with name. Max 2 decimal positions
    if(SR_vector(i)-floor(SR_vector(i))>0)
        if(SR_vector(i)*10-floor(SR_vector(i)*10)>0)
            SR_text=num2str(SR_vector(i), '%08.2f');
        else
            SR_text=num2str(SR_vector(i), '%07.1f');
        end
    else
        SR_text=num2str(SR_vector(i), '%05.0f');
    end

    SR_text = ['SR' SR_text];

    % Create folder
    SR_folder=[out_folder slash SR_text];
    mkdir(SR_folder);

    % Copy control file
    copyfile([ref_folder slash controlfile], SR_folder);

    % Open inputfile to modify strain rate
    fid_read = fopen([ref_folder slash inputfile]);
    fid_write = fopen([SR_folder slash inputfile], 'w');

    % Find SR line and include corresponding SR value
    linea_std=fgets(fid_read);
    strain_found=false;
    while ~strain_found
        while ~strncmp('STRN ', linea_std, length('STRN '))
            fprintf(fid_write, '%s', linea_std);
            linea_std=fgets(fid_read);
            strain_found = true;
        end
    end

```



```
end
if(bool_middle)
    fprintf(fid_write, 'STRN   %.2f       / strain rate\n',
            SR_vector(i)+1);
elseif(bool_middle2)
    fprintf(fid_write, 'STRN   %.2f       / strain rate\n',
            SR_vector(i)-1);
else
    fprintf(fid_write, 'STRN   %.2f       / strain rate\n',
            SR_vector(i));
end
end

while ~feof(fid_read)
    linea_std=fgets(fid_read);
    fprintf(fid_write, '%s', linea_std);
end

% Write corresponding script lines
% Steady
if(bool_steady)
    if(bool_upper)
        if i == istart
            fprintf(fid_write_script, 'cd ../%s; rm *.save; ln -s
                ../%s/C2H4.save RESTART.save; XLFLAM_230428.GFORTRAN
                .02 < control.C2H4 &> log; BACK_PID=$!; wait $
                BACK_PID\n', SR_text, ref_folder_rel(2:end));
        else
            fprintf(fid_write_script, 'cd ../%s; rm *.save; ln -s
                ../%s/C2H4.save RESTART.save; XLFLAM_230428.GFORTRAN
                .02 < control.C2H4 &> log; BACK_PID=$!; wait $
                BACK_PID\n', SR_text, SR_text_prev);
        end
    end
end
```

```
elseif (bool_lower)
    fprintf(fid_write_script, 'cd ../%s; rm *.save; ln -s ../../
        Inert/Inert/C2H4.save RESTART.save; XLFLAM_230428.
        GFORTTRAN.02 < control.C2H4\n', SR_text);
end

% Unsteady
else
    fprintf(fid_write_script, 'cd ../%s; rm *.flm; rm *.save; rm *.
        out; rm *.dat; rm oppdif.rcvr; rm viewfile; ln -s ../../../../
        Steady/Inert/Inert/C2H4.save INERT.save; ln -s ../../../../
        Steady/Upper/%s/C2H4.save UPPER.save; XLFLAM_230428.GFORTTRAN
        .02 < control.C2H4\n\n', SR_text, SR_text);
end

fclose(fid_read);
fclose(fid_write);
end

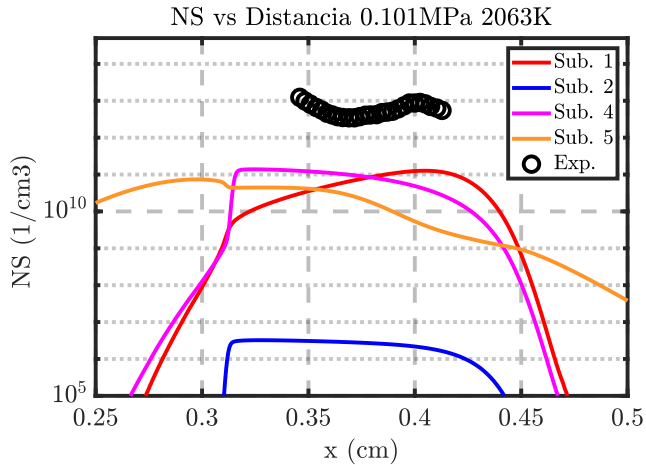
fclose(fid_write_script);
```

## Apéndice F

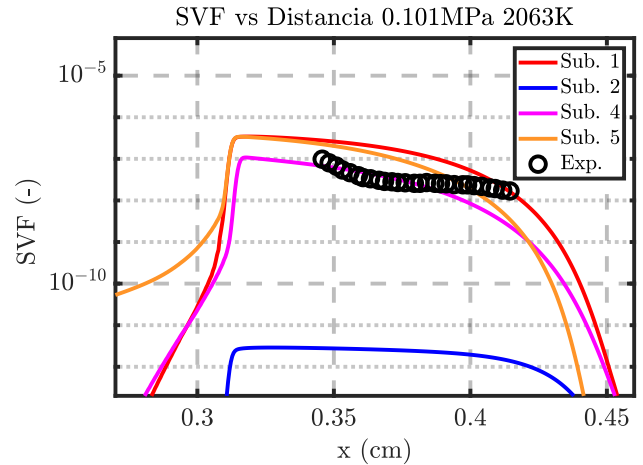
# Gráficas Validación Modelo Hollín

En el presente Apéndice se presentan otros resultados comparativos del experimento de Gleason, que se han evitado poner en el texto principal por continuidad de lectura.

### F.1. Resultados a 0.101MPa

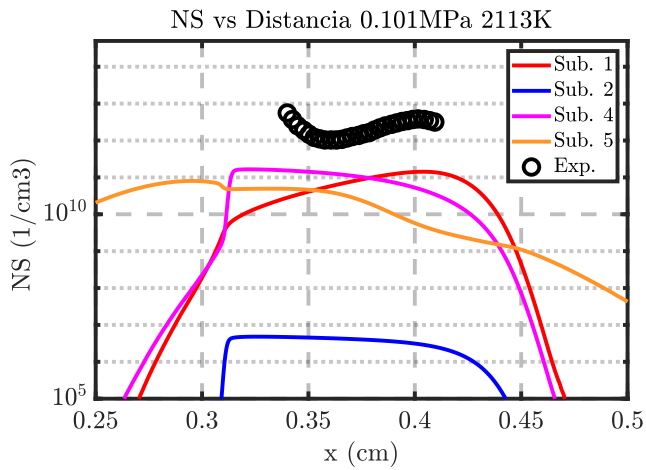


(a) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2063K

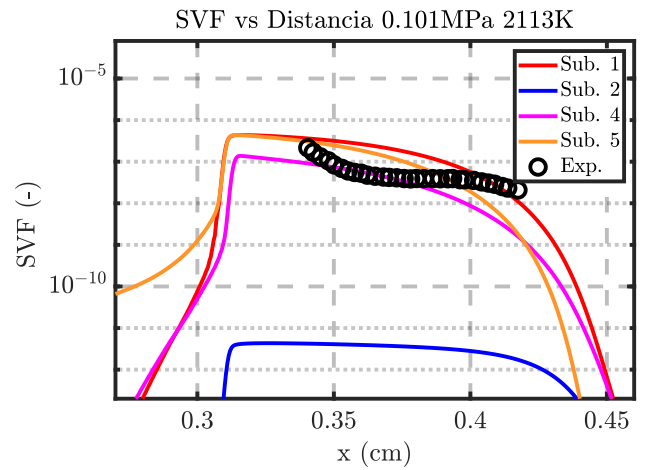


(b) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2063K

Figura F.1: Resultados hollín 1 atm 2063K

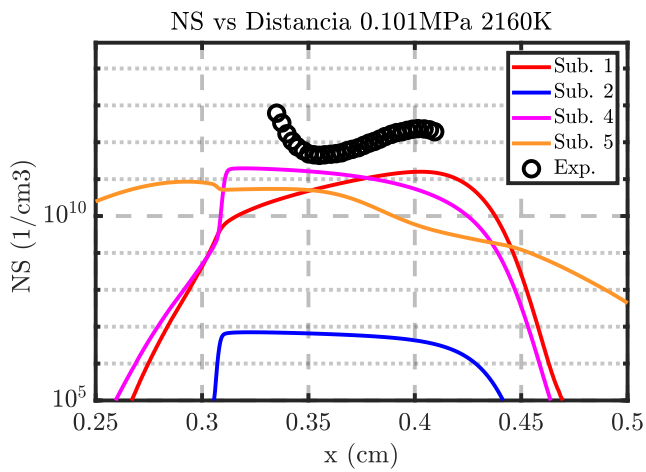


(a) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2113K

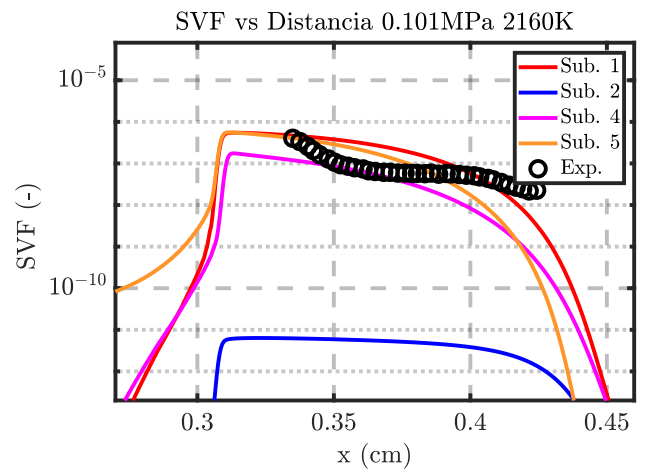


(b) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2113K

Figura F.2: Resultados hollín 1 atm 2113K



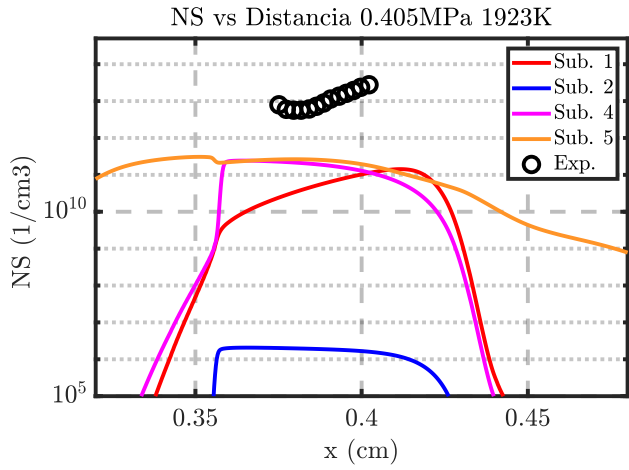
(a) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2160K



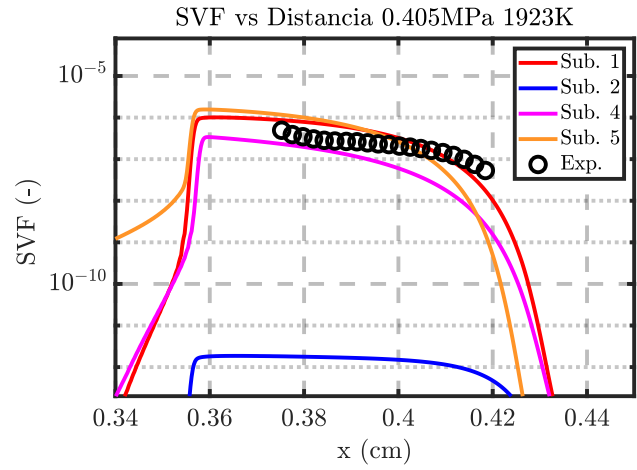
(b) Comparativa resultados  $N_S$  1 atm 2160K

Figura F.3: Resultados hollín 1 atm 2160K

F.2. Resultados a 0.405MPa

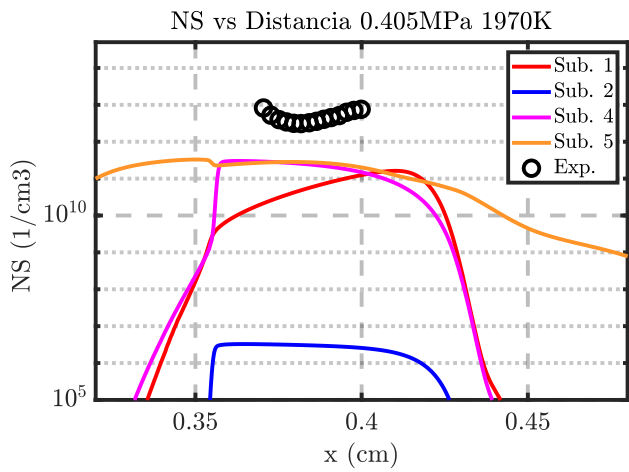


(a) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 1923K

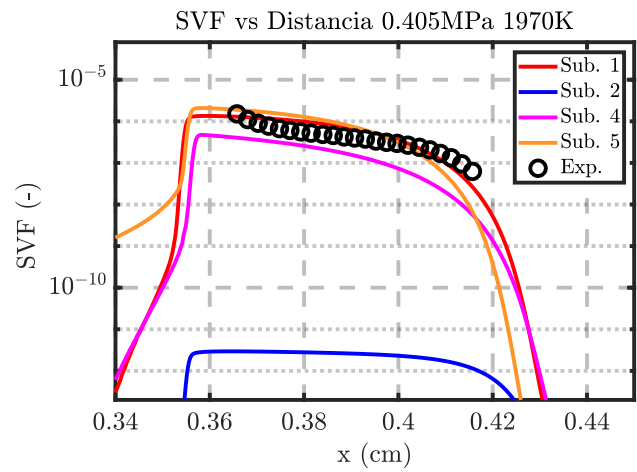


(b) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 1923K

Figura F.4: Resultados hollín 4 atm 1923K



(a) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 1970K



(b) Comparativa resultados  $N_S$  4 atm 1970K

Figura F.5: Resultados hollín 4 atm 1970K

### F.3. Resultados a 0.811MPa

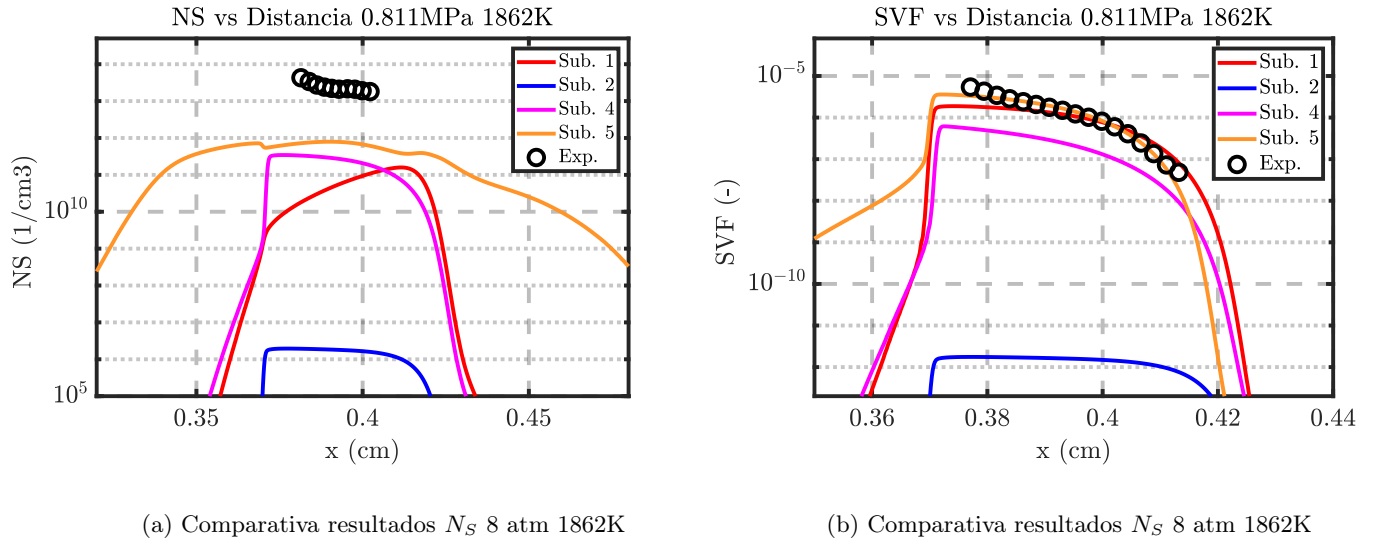


Figura F.6: Resultados hollín 8 atm 1862K

## Apéndice G

### Código 1 Tabulación - Laminar

En este Apéndice se presenta el código creado para poder convertir el archivo *.mat* en cuatro archivos *.txt* con la información tabulada, siguiendo el procedimiento explicado tanto en el texto del trabajo, como en el propio código.

```
caso = input(' Introduce the name of the .mat you want to tabulate: ','
    s');

load(caso)
Upper= flameletDF;

nuevawYcrho=Upper.rho.*Upper.wYc;
matZ=[]; matmixf=[]; matchi=[]; matYc=[]; matYcdot=[]; matF=[]; matu=[];
    matG=[]; matvy=[]; mattemp=[]; matrho=[]; matH=[]; matNS=[]; matYS=[];
matC2H4=[]; matO2=[]; matN2=[]; matCO2=[]; matH2O=[]; matCO=[]; matOH=[];
    matCH2O=[]; matC2H2=[]; matA4=[]; matcp1=[]; matcp2=[]; matcp3=[]; matcp4
    =[]; matcp5=[]; matcp6=[];
matMW=[]; matvisc=[]; matconduc=[]; matwYc=[]; matwYcYc=[]; matQnuc=[];
    matQsg=[]; matQoxO2=[]; matQoxOH=[]; matQoxO=[];
matQnnuc=[]; matQnag_Yc=[]; matnuevawYcrho=[];
%% Definimos z
z=linspace(0,1,101).^1.5;

%% Interpolamos los nuevos valores a Z

for j=1:length(Upper.SR)
```

```

[~,iuni,~] = unique(Upper.Zb(:,j));
matmixf=[matmixf,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.mixf(iuni
,j),z))];
matchi=[matchi,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.chi(iuni,j)
,z))];
matYc=[matYc,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Yc(iuni,j),z)
)];
matYcdot=[matYcdot,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Ycdot(
iuni,j),z))];
matF = [matF,transpose( interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.F(iuni,j),z))
];
matu = [matu,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.u(iuni,j),z))
];
matG = [matG,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.G(iuni,j),z))
];
matvy = [matvy,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.vy(iuni,j),
z))];
mattemp = [mattemp, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.T(iuni,
j),z))];
matrho = [matrho,transpose( interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.rho(iuni
,j),z))];
matH = [matH,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.H(iuni,j),z))
];

matC2H4 = [matC2H4,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.C2H4(
iuni,j),z))];
matO2 = [matO2,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.O2(iuni,j),
z))];
matN2 = [matN2,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.N2(iuni,j),
z))];
matCO2 = [matCO2,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.CO2(iuni,
j),z))];
matH2O = [matH2O,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.H2O(iuni,
j),z))];

```



---

```
matC0 = [matC0, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.CO(iuni, j),
    z))];
matOH = [matOH, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.OH(iuni, j),
    z))];
matCH2O = [matCH2O, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.CH2O(
    iuni, j), z))];
matC2H2 = [matC2H2, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.C2H2(
    iuni, j), z))];
matA4 = [matA4, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.A4(iuni, j),
    z))];

matcp1=[matcp1 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp1(iuni, j)
    ,z))];
matcp2=[matcp2 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp2(iuni, j)
    ,z))];
matcp3=[matcp3 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp3(iuni, j)
    ,z))];
matcp4=[matcp4 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp4(iuni, j)
    ,z))];
matcp5=[matcp5 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp5(iuni, j)
    ,z))];
matcp6=[matcp6 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp6(iuni, j)
    ,z))];
matMW=[matMW transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.MW(iuni, j), z)
    )];
matvisc=[matvisc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.visc(iuni
    ,j), z))];
matconduc=[matconduc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.
    conduc(iuni, j), z))];
matwYc=[matwYc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.wYc(iuni, j)
    ,z))];
matwYcYc=[matwYcYc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.wYcYc(
    iuni, j), z))];
```

```

matnuevawYcrho=[matnuevawYcrho transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),
nuevawYcrho(iuni,j),z))]);

if Upper.submodel=='0'
else
matQnuc=[matQnuc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qnuc(iuni
,j),z))]);
matYS = [matYS,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.YS(iuni,j),
z))]);
matNS = [matNS,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.NS(iuni,j),
z))]);
matQsg=[matQsg transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qsg(iuni,j)
,z))]);
matQox02=[matQox02 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox02(
iuni,j),z))]);
matQox0H=[matQox0H transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox0H(
iuni,j),z))]);
matQox0=[matQox0 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox0(iuni
,j),z))]);
matQox=[matQox transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox(iuni,j)
,z))]);
matQnnuc=[matQnnuc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qnnuc(
iuni,j),z))]);
matQnag_Yc=[matQnag_Yc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.
Qnag_Yc(iuni,j),z))]);
end
end

%% Defino C
%C=linspace(0,1,101);
C = fliplr(1-linspace(0,1,101).^1.5);
Yc_min = zeros(101,1);
Yc_max = matYc(:,1);

```

```

%% Ahora generamos tabla variando Z y C, buscando cada Yc e
    interpolando
tableSRC=[];% nameSRC={'ZMEAN','CMEAN','omegaYc'};
tableSPEC=[];% nameSPEC={'ZMEAN','CMEAN','OH','CO','C2H4','CH2O','O2','
    H2O','A4','C2H2'};
tablePROP=[];% namePROP={'ZMEAN','CMEAN','W','k','mu','CP1_1','CP1_2','
    CP1_3','CP1_4','CP1_5','CP1_6','CP2_1','CP2_2','CP2_3','CP2_4','
    CP2_5','CP2_6'};
tableSCALE=[];% nameSCALE={'ZMEAN','Ycmax','Ycmin','Ycmax2','Ycmin2','
    Ycminmax'};
nuevowYc=[];tabletemp=[];
for l=1:length(z)
    if z(l)==0 || z(l)==1 %Soluciones singulares
        tableSRC=[tableSRC;z(l),C(1),matnuevawYcrho(l,end)];
        tableSPEC=[tableSPEC;z(l),C(1),matOH(l,end),matCO(l,end),
            matC2H4(l,end),matCH2O(l,end),matH2O(l,end),matA4(l,end),
            matC2H2(l,end),matN2(l,end),matO2(l,end),matCO2(l,end)];
        tablePROP=[tablePROP;z(l),C(1),matMW(l,end),matconduc(l,end),
            matvisc(l,end),matcp1(l,end),matcp2(l,end),matcp3(l,end),
            matcp4(l,end),matcp5(l,end),matcp6(l,end),matcp1(l,end),
            matcp2(l,end),matcp3(l,end),matcp4(l,end),matcp5(l,end),
            matcp6(l,end)];
        nuevowYc=[nuevowYc;matwYc(l,end)*matrho(l,end)];
        tabletemp=[tabletemp; mattemp(l,end)];
        for j=2:length(C)
            tableSRC=[tableSRC;z(l),C(j),matnuevawYcrho(l,1)];
            tableSPEC=[tableSPEC;z(l),C(j),matOH(l,1),matCO(l,1),matC2H4(l
                ,1),matCH2O(l,1),matH2O(l,1),matA4(l,1),matC2H2(l,1),matN2(l
                ,1),matO2(l,1),matCO2(l,1)];
            tablePROP=[tablePROP;z(l),C(j),matMW(l,1),matconduc(l,1),
                matvisc(l,1),matcp1(l,1),matcp2(l,1),matcp3(l,1),matcp4(l,1)
                ,matcp5(l,1),matcp6(l,1),matcp1(l,1),matcp2(l,1),matcp3(l,1)
                ,matcp4(l,1),matcp5(l,1),matcp6(l,1)];
            nuevowYc=[nuevowYc;matnuevawYcrho(l,1)];
        end
    end
end

```

```

        tabletemp=[tabletemp; mattemp(1,1)];
    end

else
    %C=0 equivale a la solucion inerte
    tableSRC=[tableSRC;z(1),C(1),matnuevawYcrho(1,end)];
    tableSPEC=[tableSPEC;z(1),C(1),matOH(1,end),matCO(1,end),matC2H4
        (1,end),matCH2O(1,end),mathH2O(1,end),matA4(1,end),matC2H2(1,
        end),matN2(1,end),matO2(1,end),matCO2(1,end)];
    tablePROP=[tablePROP;z(1),C(1),matMW(1,end),matconduc(1,end),
        matvisc(1,end),matcp1(1,end),matcp2(1,end),matcp3(1,end),
        matcp4(1,end),matcp5(1,end),matcp6(1,end),matcp1(1,end),
        matcp2(1,end),matcp3(1,end),matcp4(1,end),matcp5(1,end),
        matcp6(1,end)];
    nuevowYc=[nuevowYc;matnuevawYcrho(1,end)];
    tabletemp=[tabletemp; mattemp(1,end)];
for m=2:length(C)
    Ycj = C(m)*(Yc_max(1)-Yc_min(1))+Yc_min(1); %Yc correspondiente
        a esa C
    [~,iuni,~] = unique(matYc(1,:));
    iuni=sort(iuni);
    SRj = interp1(matYc(1,iuni),Upper.SR(iuni),Ycj); %SR
        correspondiente a ese Yc
    %Generamos la tabla: columna 1 es Z, columna 2 es C y el resto
        de
    %columnas las variables
    tableSRC=[tableSRC;z(1), C(m),interp1(Upper.SR(iuni),
        matnuevawYcrho(1,iuni),SRj)];
    tableSPEC=[tableSPEC;z(1), C(m),interp1(Upper.SR,matOH(1,:),SRj
        ),interp1(Upper.SR,matCO(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matC2H4(
        1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matCH2O(1,:),SRj),interp1(Upper.
        SR,mathH2O(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matA4(1,:),SRj),interp1
        (Uppper.SR,matC2H2(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matN2(1,:),SRj)
        ,interp1(Upper.SR,matO2(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matCO2(1

```

```

        ,:),SRj)];
    tablePROP=[tablePROP;z(1), C(m),interp1(Upper.SR,matMW(1,:),SRj
        ),interp1(Upper.SR,matconduc(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,
        matvisc(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp1(1,:),SRj),interp1(
        Upper.SR,matcp2(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp3(1,:),SRj),
        interp1(Upper.SR,matcp4(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp5(1
        ,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp6(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,
        matcp1(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp2(1,:),SRj),interp1(
        Upper.SR,matcp3(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp4(1,:),SRj),
        interp1(Upper.SR,matcp5(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp6(1
        ,:),SRj)];
    nuevowYc=[nuevowYc; interp1(Upper.SR,matnuevawYcrho(1,:),SRj)];
    tabletemp=[tabletemp; interp1(Upper.SR,mattemp(1,:),SRj)];
end

end

    tableSCALE=[tableSCALE;z(1), Yc_max(1), Yc_min(1), Yc_max(1)*Yc_max
        (1), Yc_min(1)*Yc_min(1), Yc_min(1)*Yc_max(1)];

end

%% Creamos los archivos para Ayla

nameSRC={'ZMEAN','CMEAN','omegaYc'};
nameSPEC={'ZMEAN','CMEAN','OH','CO','C2H4','CH2O','H2O','A4','C2H2','N2
    ','O2','CO2'};
namePROP={'ZMEAN','CMEAN','W','k','mu','CP1_1','CP1_2','CP1_3','CP1_4',
    'CP1_5','CP1_6','CP2_1','CP2_2','CP2_3','CP2_4','CP2_5','CP2_6'};
nameSCALE={'ZMEAN','Ycmax','Ycmin','Ycmax2','Ycmin2','Ycminmax'};

nvalues1=length(z);
nvalues2=length(C);
nvariaSRC=length(nameSRC)-2;

```

```

nvariaSPEC=length(nameSPEC)-2;
nvariaPROP=length(namePROP)-2;
nvariaSCALE=length(nameSCALE)-1;
nchunk=100;

%Creamos SRC
fid=fopen('DLR_GAS_LAMINAR_SRC.txt','w');
fprintf(fid,'$*****$\n$          Source
        table for alya (Laminar)      $\n
        $*****$\n');
fprintf(fid,'\n');

fprintf(fid,'N_VALUES: %d, %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\nZMEAN
        SUBDIVISION:\n',nvalues1,nvalues2,nvariaSRC,nchunk);
fprintf(fid,'%1.8e\t',z);

fprintf(fid,'\n\nCMEAN SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid,'%1.8e\t',C);
fprintf(fid,'\n\n');

for i=1:length(nameSRC)
fprintf(fid,'%s\t',nameSRC{i}) ;
end
fprintf(fid,'\n');
for a=1:size(tableSRC,1)
fprintf(fid,'%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\n',tableSRC(a,1),tableSRC(a,2),
        tableSRC(a,3));
end
fclose(fid)

%Creamos SPEC
fid=fopen('DLR_GAS_LAMINAR_SPEC.txt','w');
fprintf(fid,'$*****$\n$          Species
        table for alya (Laminar)      $\n

```

```

    $*****$\n');
fprintf(fid, '\n');

fprintf(fid, 'N_VALUES: %d, %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\nZMEAN
    SUBDIVISION:\n', nvalues1, nvalues2, nvariaSPEC, nchunk);
fprintf(fid, '%1.8e\t', z);

fprintf(fid, '\n\nCMEAN SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid, '%1.8e\t', C);
fprintf(fid, '\n\n');

for i=1:length(nameSPEC)
fprintf(fid, '%s\t', nameSPEC{i}) ;
end
fprintf(fid, '\n');
for b=1:size(tableSPEC, 1)
fprintf(fid, '%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t
    %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\n', tableSPEC(b,1), tableSPEC(b
    ,2), tableSPEC(b,3), tableSPEC(b,4), tableSPEC(b,5), tableSPEC(b,6),
    tableSPEC(b,7), tableSPEC(b,8), tableSPEC(b,9), tableSPEC(b,10),
    tableSPEC(b,11), tableSPEC(b,12));
end
fclose(fid)

%Creamos PROP
fid=fopen('DLR_GAS_LAMINAR_PROP.txt', 'w');
fprintf(fid, '$*****$\n$ Properties
    table for alya (Laminar) $\n
    $*****$\n');
fprintf(fid, '\n');

fprintf(fid, 'N_VALUES: %d, %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\nZMEAN
    SUBDIVISION:\n', nvalues1, nvalues2, nvariaPROP, nchunk);
fprintf(fid, '%1.8e\t', z);

```

```

fprintf(fid, '\n\nCMEAN SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid, '%1.8e\t', C);
fprintf(fid, '\n\n');

for i=1:length(namePROP)
fprintf(fid, '%s\t', namePROP{i}) ;
end
fprintf(fid, '\n');
for c=1:size(tablePROP,1)
fprintf(fid, '%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t
%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t
e\t %1.8e\n', tablePROP(c,1), tablePROP(c,2), tablePROP(c,3), tablePROP(c,4),
tablePROP(c,5), tablePROP(c,6), tablePROP(c,7), tablePROP(c,8),
tablePROP(c,9), tablePROP(c,10), tablePROP(c,11), tablePROP(c,12),
tablePROP(c,13), tablePROP(c,14), tablePROP(c,15), tablePROP(c,16),
tablePROP(c,17));
end
fclose(fid)

%Creamos SCALE
fid=fopen('DLR_GAS_LAMINAR_SCALE.txt', 'w');
fprintf(fid, '$*****$\n$          Scaling
table for alya (Laminar)    $\n
$*****$\n');
fprintf(fid, '\n');

fprintf(fid, 'N_VALUES: %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\n\nZMEAN
SUBDIVISION:\n', nvalues1, nvariaSCALE, nchunk);
fprintf(fid, '%1.8e\t', z);

fprintf(fid, '\n\n');

for i=1:length(nameSCALE)

```



---

```
fprintf(fid, '%s\t', nameSCALE{i}) ;
end
fprintf(fid, '\n');
for d=1:size(tableSCALE,1)
fprintf(fid, '%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\n', tableSCALE(d
,1), tableSCALE(d,2), tableSCALE(d,3), tableSCALE(d,4), tableSCALE(d,5),
tableSCALE(d,6));
end
fclose(fid)
```



## Apéndice H

### Código 2 Tabulación - Turbulenta

En este caso la tabulación es muy similar al mostrado en el Apéndice G pero, a diferencia del caso laminar, en esta tabulación debe incluirse el efecto de las varianzas, las cuales surgen, tal y como se ha explicado en el Capítulo 5, al realizar la integral con lo considerado como Beta PDF.

```
caso=input('Introduce the name of the .mat you want to tabulate:','s');

load(caso)
Upper= flameletDF;

nuevawYcrho=Upper.rho.*Upper.wYc;
matZ=[]; matmixf=[]; matchi=[]; matYc=[]; matYc_dot=[]; matF=[]; matu=[];
    matG=[]; matvy=[]; mattemp=[]; matrho=[]; matH=[]; matNS=[]; matYS=[];
matC2H4=[]; matO2=[]; matN2=[]; matCO2=[]; matH2O=[]; matCO=[]; matOH=[];
    matCH2O=[]; matC2H2=[]; matA4=[]; matcp1=[]; matcp2=[]; matcp3=[]; matcp4
    =[]; matcp5=[]; matcp6=[];
matMW=[]; matvisc=[]; matconduc=[]; matwYc=[]; matwYcYc=[]; matQnuc=[];
    matQsg=[]; matQoxO2=[]; matQoxOH=[]; matQoxO=[];
matQnnuc=[]; matQnag_Yc=[]; matnuevawYcrho=[];
%% Definimos z
z=linspace(0,1,101).^1.5;
zvar=linspace(0,1,11).^3;

%% Interpolamos los nuevos valores a Z
```

```

for j=1:length(Upper.SR)
    [~,iuni,~] = unique(Upper.Zb(:,j));
    matmixf=[matmixf,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.mixf(iuni
        ,j),z))];
    matchi=[matchi,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.chi(iuni,j)
        ,z))];
    matYc=[matYc,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Yc(iuni,j),z)
        )];
    matYcdot=[matYcdot,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Ycdot(
        iuni,j),z))];
    matF = [matF,transpose( interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.F(iuni,j),z))
        ];
    matu = [matu,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.u(iuni,j),z))
        ];
    matG = [matG,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.G(iuni,j),z))
        ];
    matvy = [matvy,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.vy(iuni,j),
        z))];
    mattemp = [mattemp, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.T(iuni,
        j),z))];
    matrho = [matrho,transpose( interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.rho(iuni
        ,j),z))];
    matH = [matH,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.H(iuni,j),z))
        ];

    matC2H4 = [matC2H4,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.C2H4(
        iuni,j),z))];
    matO2 = [matO2,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.O2(iuni,j),
        z))];
    matN2 = [matN2,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.N2(iuni,j),
        z))];
    matCO2 = [matCO2,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.CO2(iuni,
        j),z))];

```

---

```

matH2O = [matH2O, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.H2O(iuni,
    j), z))];
matCO = [matCO, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.CO(iuni, j),
    z))];
matOH = [matOH, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.OH(iuni, j),
    z))];
matCH2O = [matCH2O, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.CH2O(
    iuni, j), z))];
matC2H2 = [matC2H2, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.C2H2(
    iuni, j), z))];
matA4 = [matA4, transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.A4(iuni, j),
    z))];

matcp1=[matcp1 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp1(iuni, j)
    , z))];
matcp2=[matcp2 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp2(iuni, j)
    , z))];
matcp3=[matcp3 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp3(iuni, j)
    , z))];
matcp4=[matcp4 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp4(iuni, j)
    , z))];
matcp5=[matcp5 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp5(iuni, j)
    , z))];
matcp6=[matcp6 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.cp6(iuni, j)
    , z))];
matMW=[matMW transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.MW(iuni, j), z)
    )];
matvisc=[matvisc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.visc(iuni
    , j), z))];
matconduc=[matconduc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.
    conduc(iuni, j), z))];
matwYc=[matwYc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni, j), Upper.wYc(iuni, j)
    , z))];

```

```

matwYcYc=[matwYcYc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.wYcYc(
    iuni,j),z))];
matnuevawYcrho=[matnuevawYcrho transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),
    nuevawYcrho(iuni,j),z))];

if Upper.submodel=='0'
else
matQnuc=[matQnuc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qnuc(iuni
    ,j),z))];
matYS = [matYS,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.YS(iuni,j),
    z))];
matNS = [matNS,transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.NS(iuni,j),
    z))];
matQsg=[matQsg transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qsg(iuni,j)
    ,z))];
matQox02=[matQox02 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox02(
    iuni,j),z))];
matQox0H=[matQox0H transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox0H(
    iuni,j),z))];
matQox0=[matQox0 transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox0(iuni
    ,j),z))];
matQox=[matQox transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qox(iuni,j)
    ,z))];
matQnnuc=[matQnnuc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.Qnnuc(
    iuni,j),z))];
matQnag_Yc=[matQnag_Yc transpose(interp1(Upper.Zb(iuni,j),Upper.
    Qnag_Yc(iuni,j),z))];
end
end

%% Defino C
%C=linspace(0,1,101);
C = fliplr(1-linspace(0,1,101).^1.5);
Cvar=linspace(0,1,11).^3;

```

```

Yc_min = zeros(101,1);
Yc_max = matYc(:,1);

%% Ahora generamos tabla variando Z y C, buscando cada Yc e
    interpolando
tableSRC=[];% nameSRC={'ZMEAN','CMEAN','omegaYc'};
tableSPEC=[];% nameSPEC={'ZMEAN','CMEAN','OH','CO','C2H4','CH2O','O2','
    H2O','A4','C2H2'};
tablePROP=[];% namePROP={'ZMEAN','CMEAN','W','k','mu','CP1_1','CP1_2','
    CP1_3','CP1_4','CP1_5','CP1_6','CP2_1','CP2_2','CP2_3','CP2_4','
    CP2_5','CP2_6'};
tableSCALE=[];% nameSCALE={'ZMEAN','Ycmax','Ycmin','Ycmax2','Ycmin2','
    Ycminmax'};
nuevowYc=[];tabletemp=[];
for l=1:length(z)
    if z(l)==0 || z(l)==1 %Soluciones singulares
        tableSRC=[tableSRC;z(l),C(1),matnuevawYcrho(1,end),matwYcYc(1,
            end)];
        tableSPEC=[tableSPEC;z(l),C(1),matOH(1,end),matCO(1,end),
            matC2H4(1,end),matCH2O(1,end),matH2O(1,end),matA4(1,end),
            matC2H2(1,end),matN2(1,end),matO2(1,end),matCO2(1,end)];
        tablePROP=[tablePROP;z(l),C(1),matMW(1,end),matconduc(1,end),
            matvisc(1,end),matcp1(1,end),matcp2(1,end),matcp3(1,end),
            matcp4(1,end),matcp5(1,end),matcp6(1,end),matcp1(1,end),
            matcp2(1,end),matcp3(1,end),matcp4(1,end),matcp5(1,end),
            matcp6(1,end)];
        nuevowYc=[nuevowYc;matwYc(1,end)*matrho(1,end)];
        tabletemp=[tabletemp; mattemp(1,end)];
        for j=2:length(C)
            tableSRC=[tableSRC;z(l),C(j),matnuevawYcrho(1,1),matwYcYc(1,1)
                ];
            tableSPEC=[tableSPEC;z(l),C(j),matOH(1,1),matCO(1,1),matC2H4(1
                ,1),matCH2O(1,1),matH2O(1,1),matA4(1,1),matC2H2(1,1),matN2(1
                ,1),matO2(1,1),matCO2(1,1)];
        end
    end
end

```

```

tablePROP=[tablePROP;z(1),C(j),matMW(1,1),matconduc(1,1),
    matvisc(1,1),matcp1(1,1),matcp2(1,1),matcp3(1,1),matcp4(1,1)
    ,matcp5(1,1),matcp6(1,1),matcp1(1,1),matcp2(1,1),matcp3(1,1)
    ,matcp4(1,1),matcp5(1,1),matcp6(1,1)];
nuevowYc=[nuevowYc;matnuevawYcrho(1,1)];
tabletemp=[tabletemp; mattemp(1,1)];
end

else
%C=0 equivale a la solucion inerte
tableSRC=[tableSRC;z(1),C(1),matnuevawYcrho(1,end),matwYcYc(1,
    end)];
tableSPEC=[tableSPEC;z(1),C(1),matOH(1,end),matCO(1,end),matC2H4
    (1,end),matCH2O(1,end),matH2O(1,end),matA4(1,end),matC2H2(1,
    end),matN2(1,end),matO2(1,end),matCO2(1,end)];
tablePROP=[tablePROP;z(1),C(1),matMW(1,end),matconduc(1,end),
    matvisc(1,end),matcp1(1,end),matcp2(1,end),matcp3(1,end),
    matcp4(1,end),matcp5(1,end),matcp6(1,end),matcp1(1,end),
    matcp2(1,end),matcp3(1,end),matcp4(1,end),matcp5(1,end),
    matcp6(1,end)];
nuevowYc=[nuevowYc;matnuevawYcrho(1,end)];
tabletemp=[tabletemp; mattemp(1,end)];
for m=2:length(C)
Ycj = C(m)*(Yc_max(1)-Yc_min(1))+Yc_min(1); %Yc correspondiente
    a esa C
[~,iuni,~] = unique(matYc(1,:));
iuni=sort(iuni);
SRj = interp1(matYc(1,iuni),Upper.SR(iuni),Ycj); %SR
    correspondiente a ese Yc
%Generamos la tabla: columna 1 es Z, columna 2 es C y el resto
    de columnas las variables
tableSRC=[tableSRC;z(1), C(m),interp1(Upper.SR(iuni),
    matnuevawYcrho(1,iuni),SRj),interp1(Upper.SR(iuni),matwYcYc(
    1,iuni),SRj)];

```



```

tableSPEC=[tableSPEC;z(1), C(m),interp1(Upper.SR,matOH(1,:),SRj
),interp1(Upper.SR,matCO(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matC2H4(
1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matCH2O(1,:),SRj),interp1(Upper.
SR,matH2O(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matA4(1,:),SRj),interp1
(Upper.SR,matC2H2(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matN2(1,:),SRj)
,interp1(Upper.SR,matO2(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matCO2(1
,:),SRj)];
tablePROP=[tablePROP;z(1), C(m),interp1(Upper.SR,matMW(1,:),SRj
),interp1(Upper.SR,matconduc(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,
matvisc(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp1(1,:),SRj),interp1(
Upper.SR,matcp2(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp3(1,:),SRj),
interp1(Upper.SR,matcp4(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp5(1
,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp6(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,
matcp1(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp2(1,:),SRj),interp1(
Upper.SR,matcp3(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp4(1,:),SRj),
interp1(Upper.SR,matcp5(1,:),SRj),interp1(Upper.SR,matcp6(1
,:),SRj)];
nuevowYc=[nuevowYc; interp1(Upper.SR,matnuevawYcrho(1,:),SRj)];
tabletemp=[tabletemp; interp1(Upper.SR,mattemp(1,:),SRj)];

```

end

end

```

tableSCALE=[tableSCALE;z(1), Yc_max(1), Yc_min(1), Yc_max(1)*Yc_max
(1), Yc_min(1)*Yc_min(1), Yc_min(1)*Yc_max(1)];

```

end

```

zturb=z;zvar=linspace(0,1,11).^3;
Cturb=C;Cvar=linspace(0,1,11).^3;
wx = BetaWeights(z,zturb,zvar);
wx = reshape(wx,length(zturb)*length(zvar),length(z));
wy = BetaWeights(C,Cturb,Cvar);
wy = reshape(wy,length(Cturb)*length(Cvar),length(C));

```

```

tableSCALEturb = zeros(length(zturb),length(zvar),size(tableSCALE,2)
    -1);
tableSRCTurb = zeros(length(zturb),length(zvar),length(Cturb),length(
    Cvar),size(tableSRC,2)-2);
tableSPECTurb = zeros(length(zturb),length(zvar),length(Cturb),length(
    Cvar),size(tableSPEC,2)-2);
tablePROPturb = zeros(length(zturb),length(zvar),length(Cturb),length(
    Cvar),size(tablePROP,2)-2);
vector=[];matriz=[];isovector=[];isolinea=[];

tableSRClam=reshape(tableSRC(:,3:end),length(z),length(C),size(tableSRC
    ,2)-2);
tableSCALElam=reshape(tableSCALE(:,2:end),length(z),size(tableSCALE,2)
    -1);
tablePROPlam=reshape(tablePROP(:,3:end),length(z),length(C),size(
    tablePROP,2)-2);
tableSPEClam=reshape(tableSPEC(:,3:end),length(z),length(C),size(
    tableSPEC,2)-2);
    for i = 1:size(tableSRClam,3)
        tableSRCTurb(:,:,,:,i) = reshape(wx*squeeze(tableSRClam(:,:,,i)
            )*wy',length(zturb),length(zvar),length(Cturb),length(Cvar))
            ;
    end
    for i = 1:size(tableSCALElam,3)
        tableSCALEturb(:,:,i) = reshape(wx*squeeze(tableSCALElam(:,i)),
            length(zturb),length(zvar));
    end
    for i = 1:size(tablePROPlam,3)
        tablePROPturb(:,:,,:,i) = reshape(wx*squeeze(tablePROPlam(:,:,,
            i))*wy',length(zturb),length(zvar),length(Cturb),length(Cvar
            ));
    end
    for i = 1:size(tableSPEClam,3)

```

---

```

        tableSPECTurb(:,:,:,i) = reshape(wx*squeeze(tableSPEClam(:,: ,
            i))*wy',length(zturb),length(zvar),length(Cturb),length(Cvar
            ));

    end

tableSRCres=zeros(length(zturb)*length(zvar)*length(Cturb)*length(Cvar)
    ,size(tableSRC,2)+2);
tableSPECres=zeros(length(zturb)*length(zvar)*length(Cturb)*length(Cvar)
    ),size(tableSPEC,2)+2);
tableSCALEres=zeros(length(zturb)*length(zvar),size(tableSCALE,2)+1);
tablePROPres=zeros(length(zturb)*length(zvar)*length(Cturb)*length(Cvar)
    ),size(tablePROP,2)+2);

tableSRCres(:,5:end)=reshape(tableSRCturb,length(zturb)*length(zvar)*
    length(Cturb)*length(Cvar),size(tableSRC,2)-2);
tableSPECres(:,5:end)=reshape(tableSPECTurb,length(zturb)*length(zvar)*
    length(Cturb)*length(Cvar),size(tableSPEC,2)-2);
tableSCALEres(:,3:end)=reshape(tableSCALEturb,length(zturb)*length(zvar)
    ),size(tableSCALE,2)-1);
tablePROPres(:,5:end)=reshape(tablePROPturb,length(zturb)*length(zvar)*
    length(Cturb)*length(Cvar),size(tablePROP,2)-2);

for i=1:length(z)
    for j=1:length(zvar)
        for k=1:length(C)
            for m=1:length(Cvar)
                tableSRCres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+m
                    ,4)=Cvar(m);
                tableSRCres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+m
                    ,3)=C(k);
                tableSRCres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+m
                    ,2)=zvar(j);
                tableSRCres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+m
                    ,1)=z(i);
            end
        end
    end
end

```

```

        tableSPECres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,4)=Cvar(m);
        tableSPECres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,3)=C(k);
        tableSPECres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,2)=zvar(j);
        tableSPECres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,1)=z(i);

        tablePROPres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,4)=Cvar(m);
        tablePROPres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,3)=C(k);
        tablePROPres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,2)=zvar(j);
        tablePROPres((i-1)*(11*101*11)+(j-1)*(101*11)+(k-1)*11+
            m,1)=z(i);

        end

    end

    tableSCALEres((i-1)*11+j,2)=zvar(j);
    tableSCALEres((i-1)*11+j,1)=z(i);

end

end

%% Creamos los archivos para Ayla

nameSRC={'ZMEAN','ZVAR','CMEAN','CVAR','omegaYc','omegaYcYc'};
nameSPEC={'ZMEAN','ZVAR','CMEAN','CVAR','OH','CO','C2H4','CH2O','H2O','
    A4','C2H2','N2','O2','CO2'};
namePROP={'ZMEAN','ZVAR','CMEAN','CVAR','W','k','mu','CP1_1','CP1_2','
    CP1_3','CP1_4','CP1_5','CP1_6','CP2_1','CP2_2','CP2_3','CP2_4','
    CP2_5','CP2_6'};

```

```

nameSCALE={'ZMEAN','ZVAR','Ycmax','Ycmin','Ycmax2','Ycmin2','Ycminmax'
};

nvalues1=length(z);
nvalues2=length(C);
nvalues3=length(zvar);
nvalues4=length(Cvar);
nvariaSRC=length(nameSRC)-4;
nvariaSPEC=length(nameSPEC)-4;
nvariaPROP=length(namePROP)-4;
nvariaSCALE=length(nameSCALE)-2;
nchunk=100;

%Creamos SRC
fid=fopen('DLR_GAS_TURBULENT_SRC.txt','w');
fprintf(fid,'$*****$\n$           Source
      table for alya (Turbulent)   $\n
      $*****$\n');
fprintf(fid,'\n');

fprintf(fid,'N_VALUES: %d, %d, %d, %d\nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\n\
      nZMEAN SUBDIVISION:\n',nvalues1,nvalues2,nvalues3,nvalues4,nvariaSRC
      ,nchunk);
fprintf(fid,'%1.8e\t',z);

fprintf(fid,'\n\nZVAR SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid,'%1.8e\t',zvar);
fprintf(fid,'\n\n');

fprintf(fid,'\n\nCMEAN SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid,'%1.8e\t',C);
fprintf(fid,'\n\n');

fprintf(fid,'\n\nCVAR SUBDIVISION:\n');

```

```

fprintf(fid, '%1.8e\t', Cvar);
fprintf(fid, '\n\n');

for i=1:length(nameSRC)
fprintf(fid, '%s\t', nameSRC{i}) ;
end
fprintf(fid, '\n');
for a=1:size(tableSRCres,1)
fprintf(fid, '%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\n',
        tableSRCres(a,1), tableSRCres(a,2), tableSRCres(a,3), tableSRCres(a,4),
        tableSRCres(a,5), tableSRCres(a,6));
end
fclose(fid)

%Creamos SPEC
fid=fopen('DLR_GAS_TURBULENT_SPEC.txt', 'w');
fprintf(fid, '$*****$\n$      Species
        table for alya (Turbulent)  $\n
        $*****$\n');
fprintf(fid, '\n');

fprintf(fid, 'N_VALUES: %d, %d, %d, %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\n\
        nZMEAN SUBDIVISION:\n', nvalues1, nvalues2, nvalues3, nvalues4,
        nvariaSPEC, nchunk);
fprintf(fid, '%1.8e\t', z);

fprintf(fid, '\n\nZVAR SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid, '%1.8e\t', zvar);
fprintf(fid, '\n\n');

fprintf(fid, '\n\nCMEAN SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid, '%1.8e\t', C);
fprintf(fid, '\n\n');

```

```

fprintf(fid, '\n\nCVAR SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid, '%1.8e\t', Cvar);
fprintf(fid, '\n\n');

for i=1:length(nameSPEC)
fprintf(fid, '%s\t', nameSPEC{i}) ;
end
fprintf(fid, '\n');
for b=1:size(tableSPECres,1)
fprintf(fid, '%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t
%1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\t %1.8e\n',
tableSPECres(b,1), tableSPECres(b,2), tableSPECres(b,3), tableSPECres(b
,4), tableSPECres(b,5), tableSPECres(b,6), tableSPECres(b,7),
tableSPECres(b,8), tableSPECres(b,9), tableSPECres(b,10), tableSPECres(
b,11), tableSPECres(b,12), tableSPECres(b,13), tableSPECres(b,14));
end
fclose(fid)

%Creamos PROP
fid=fopen('DLR_GAS_TURBULENT_PROP.txt', 'w');
fprintf(fid, '$*****$\n$ Properties
table for alya (Turbulent) $\n
$*****$\n');
fprintf(fid, '\n');

fprintf(fid, 'N_VALUES: %d, %d, %d, %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\n\
nZMEAN SUBDIVISION:\n', nvalues1, nvalues2, nvalues3, nvalues4,
nvariaPROP, nchunk);
fprintf(fid, '%1.8e\t', z);

```





---

```

fid=fopen('DLR_GAS_TURBULENT_SCALE.txt','w');
fprintf(fid,'$*****$\n$      Scaling
      table for alya (Turbulent)  $\n
      $*****$\n');
fprintf(fid,'\n');

fprintf(fid,'N_VALUES: %d, %d \nN_VARI: %d \nN_CHUNK: %d \n\nZMEAN
      SUBDIVISION:\n',nvalues1,nvalues3,nvariaSCALE,nchunk);
fprintf(fid,'%1.8e\t',z);
fprintf(fid,'\n\n');

fprintf(fid,'\n\nZVAR SUBDIVISION:\n');
fprintf(fid,'%1.8e\t',zvar);
fprintf(fid,'\n\n');

for i=1:length(nameSCALE)
fprintf(fid,'%s\t',nameSCALE{i}) ;
end
fprintf(fid,'\n');
for d=1:size(tableSCALeres,1)
fprintf(fid,'%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\t%1.8e\n',
      tableSCALeres(d,1),tableSCALeres(d,2),tableSCALeres(d,3),
      tableSCALeres(d,4),tableSCALeres(d,5),tableSCALeres(d,6),
      tableSCALeres(d,7));
end
fclose(fid)

```