



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

ESTUDIO CFD DE LA INYECCIÓN Y MEZCLA DE
HIDRÓGENO EN QUEMADORES DE FLUJO CONTINUO

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Aeroespacial

AUTOR/A: Serrano García, Antonio Javier

Tutor/a: Martí Gómez-Aldaraví, Pedro

CURSO ACADÉMICO: 2022/2023

Universidad Politécnica de Valencia

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO

ESTUDIO CFD DE LA INYECCIÓN Y MEZCLA
DE HIDRÓGENO EN QUEMADORES DE FLUJO
CONTINUO

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Aeroespacial

Departamento de Máquinas y Motores Térmicos

AUTOR: Antonio Javier Serrano García

PROFESOR TUTOR: Pedro Martí Gómez-Aldaraví

Valencia, julio de 2023

Agradecimientos

En primer lugar, agradecer al que ha sido mi tutor en este proyecto, Pedro, así como al Departamento de Máquinas y Motores Térmicos por brindar las herramientas necesarias para su realización.

Si bien todo esfuerzo tiene recompensa, no es posible conllevar dicho esfuerzo sin algún pilar en el que apoyarte. Mi recompensa se la debo a todas aquellas personas que me han apoyado a lo largo de estos cuatro años de carrera, quienes me han tendido la mano para recuperarme tras cada obstáculo. A mis padres y mis hermanos, por apoyarme en el camino que he elegido seguir y darme un lugar en el que siempre sentirme seguro. A mis amigos del pueblo, por hacerme valorar esa amistad que tantos años se ha conservado aunque las circunstancias hayan cambiado tanto. También a mi pareja, quien tanto me ha ayudado a creer en mis capacidades y mejorar como persona. A Cristina, Queco, Mario, Javi y Joan, por hacerme recordar con disfrute tanto los buenos como los malos momentos que esta etapa nos ha brindado...

Resumen

Durante las últimas décadas, y especialmente en occidente, la concienciación acerca de la conservación del medio ambiente y la preocupación social por el cambio climático del planeta han ido incrementando. Muchos gobiernos aplican sobre los distintos sectores de la industria unas medidas cada vez más restrictivas en cuanto a emisiones de gases de efecto invernadero u otros contaminantes. Esto sitúa al sector del transporte, y por consiguiente al sector de la aviación, bajo el foco mediático y obliga a los fabricantes de productos aeronáuticos a adaptar su tecnología para cumplir con las nuevas normativas. Uno de los cambios tecnológicos más relevantes en vías de desarrollo es la implementación de hidrógeno como combustible de aviación, lo cual requiere importantes adaptaciones en la aeronave y, especialmente, en su planta propulsiva. En este trabajo se hace uso de software CFD (*Computational Fluid Mechanics*) para estudiar el proceso de inyección de hidrógeno en un quemador de flujo continuo y caracterizar la mezcla de aire-combustible. Esto permite obtener información relevante en cuanto a estabilidad de llama, consumo de combustible, potencia generada y rendimiento del quemador.

Palabras clave: CFD, LES, Hidrógeno, Inyección

Resum

Durant les últimes dècades, i especialment en occident, la conscienciació sobre la *coservación del medi ambient i la preocupació social pel canvi climàtic del planeta han anat incrementant. Molts governs apliquen sobre els diferents sectors de la indústria unes mesures cada vegada més restrictives quant a emissions de gasos d'efecte d'hivernacle o altres contaminants. Això situa al sector del transport, i per consegüent al sector de l'aviació, sota el focus mediàtic i obliga els fabricants de productes aeronàutics a adaptar la seua tecnologia per a complir amb les noves normatives. Un dels canvis tecnològics més rellevants en vies de desenvolupament és la implementació d'hidrogen com a combustible d'aviació, la qual cosa requereix importants adaptacions en l'aeronau i, especialment, en la seua planta propulsiva. En aquest treball es fa ús de programari CFD (*Computational Fluid Mechanics*) per a estudiar el procés d'injecció d'hidrogen en un cremador de flux continu i caracteritzar la mescla d'aire-combustible. Això permet obtindre informació rellevant quant a estabilitat de flama, consum de combustible, potència generada i rendiment del cremador.

Palabras clave: CFD, LES, Hidrogen, Injecció

Abstract

Over the last decades, and especially in the Western world, awareness of environmental conservation and social concern about the planet's climate change have been increasing. Many governments are implementing increasingly restrictive measures on various industrial sectors regarding greenhouse gas emissions and other pollutants. This puts the transportation sector, and consequently the aviation sector, in the media spotlight and forces aeronautical product manufacturers to adapt their technology to comply with the new regulations. One of the most relevant technological changes in development is the implementation of hydrogen as aviation fuel, which requires significant adaptations in the aircraft and, especially, in its propulsion system. This study utilizes Computational Fluid Mechanics (CFD) software to investigate the hydrogen injection process in a continuous flow burner and characterize the air-fuel mixture. This allows obtaining relevant information regarding flame stability, fuel consumption, power generated, and burner performance.

Palabras clave: CFD, LES, Hydrogen, Injection

Índice

1. Introducción	6
1.1. Emisiones contaminantes en el sector aeronáutico	6
1.2. Hidrógeno como combustible de aviación	7
1.3. Motivación	8
1.4. Objetivos	9
2. Fundamentos de la inyección de combustible en aeroreactores	11
2.1. Conceptos generales	11
2.2. Cámara de combustión	12
2.3. Preparación del combustible	14
2.4. Descripción del caso de estudio	15
3. Metodología CFD	19
3.1. Fundamentos	19
3.1.1. Ecuaciones de Navier-Stokes	19
3.1.2. Esquemas de discretización	21
3.1.3. Modelado de la turbulencia	22
3.2. Preproceso	27
3.2.1. Malla computacional	27
3.2.2. Condiciones de contorno	28
3.2.3. Condiciones iniciales	29
3.3. Postproceso	31
3.3.1. Análisis transitorio del proceso de inyección	31
3.3.2. Análisis en frecuencia	33
3.3.3. Validación: Índices de calidad en LES	36
4. Resultados	41
4.1. Caso base	41
4.1.1. Campo de velocidades	41
4.1.2. Mezcla	45
4.1.3. Estructura del flujo	46

5. Conclusiones y desarrollos futuros	49
5.1. Conclusiones	49
5.2. Desarrollos futuros	50
6. Bibliografía	52
7. Pliego de Condiciones	56
7.1. Condiciones y normas generales	56
7.1.1. Obligaciones y derechos de los trabajadores	56
7.1.2. Condiciones del puesto de trabajo	57
7.2. Condiciones particulares	60
7.2.1. Especificaciones técnicas	60
8. Presupuesto	62
8.1. Planteamiento del presupuesto	62
8.1.1. Metodología presupuestaria	62
8.1.2. Costes a tener en cuenta	62
8.1.3. Desglose de costes unitarios	64
8.1.4. Presupuesto total	66

Índice de figuras

1.	Contribuïón de los distintos sectores a las emisiones globales de efecto invernadero [1].	6
2.	Pronóstico de las emisiones anuales de gases de efecto invernadero para distintos planes de actuación o " <i>pathways</i> ". [1]	7
3.	Esquema simplificado de un motor turbojet [2].	11
4.	Tipos de cámara de combustión según su disposición: A) tubular, B) anular, C) tubo-anular	12
5.	Esquema simplificado de los elementos de una cámara de combustión [3].	13
6.	Esquema simplificado del flujo de aire y combustible en una cámara de combustión [4].	13
7.	Estructura habitual del flujo en inyectores tipo <i>swirler</i> [5].	16
8.	Geometría del quemador experimental " <i>KIAI burner</i> ".	17
9.	Geometría del inyector.	17
10.	Tipos de celdas según su topología.	22
11.	Esquema de un flujo laminar frente a a un flujo turbulento.	22
12.	Diagrama de la distribución de energía cinética turbulenta (E) en función del número de onda k	24
13.	Comparativa del nivel de detalle de la turbulencia resuelto por los enfoques RANS, LES y DNS.	26
14.	Malla computacional establecida para el caso de estudio.	28
15.	Puntos de análisis del proceso transitorio situados en el dominio.	31
16.	Evolución temporal de la concentración de hidrógeno [H_2] en el Punto 4.	33
17.	Evolución temporal de la concentración de hidrógeno [H_2] en los distintos puntos de monitorizado.	34
18.	Evolución temporal del módulo de la velocidad U en los distintos puntos de monitorizado.	35
19.	Evolución temporal de las fluctuaciones de presión ΔP en los distintos puntos de monitorizado.	36
20.	Comparativa entre el estudio de frecuencias dominantes realizado en este trabajo (a) y el realizado en la bibliografía [5] (b).	37
21.	Promediado temporal del índice LES_IQ_k en el plano [$x = 0$].	38

22.	Evolución del índice LES_IQ_k a lo largo del eje $[x = 0, y = 0]$	38
23.	Promediado temporal del índice LES_IQ_v en el plano $[x = 0]$	39
24.	Promediado de las componentes de la velocidad: a) axial U_z , b) tangencial U_θ y c) radial U_r	42
25.	Promediado del RMS de las fluctuaciones de velocidad en las tres componentes: a) axial u'_a , b) tangencial u'_θ y c) radial u'_r	42
26.	Promediado de la velocidad axial U_z en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z	43
27.	Promediado de la velocidad tangencial U_θ en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z	43
28.	Promediado de la velocidad radial U_r en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z	43
29.	Promediado del RMS de la velocidad axial u'_a en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z	44
30.	Promediado del RMS de la velocidad tangencial u'_θ en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z	44
31.	Promediado del RMS de la velocidad radial u'_r en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z	44
32.	Evolución temporal de la concentración de hidrógeno $[H_2]$ en el dominio compu- tacional.	45
33.	Contorno de velocidad sobre iso-superficies de concentración de hidrógeno corres- pondientes a los límites de inflamabilidad de la mezcla ($[H_2] = 0,04$ y $[H_2] = 0,75$).	46
34.	Visualización del PVC (<i>Precessing Vortex Core</i>). Iso-superficie de presión (azul) e iso-superficie de velocidad axial $U_z = -4 \text{ m/s}$ (blanco).	47
35.	Visualización de la CRZ (<i>Corner Recirculation Zone</i>). Líneas de corriente del flujo mostrando el promedio de la velocidad axial.	47

Índice de tablas

1.	Tamaño de elementos en las distintas regiones de la malla polihédrica empleada.	28
2.	Condiciones de contorno en la inyección de H ₂ .	29
3.	Condiciones de contorno en la inyección de N ₂ .	29
4.	Condiciones de contorno en la sección de escape.	29
5.	Condiciones de contorno en las paredes del quemador.	29
6.	Condiciones iniciales del dominio	30
7.	Localización de los puntos de análisis del proceso transitorio.	32

1. Introducción

1.1. Emisiones contaminantes en el sector aeronáutico

Es bien conocido que el sector del transporte es un importante contribuidor a las emisiones de gases de efecto invernadero, los cuales son una de las principales causas del cambio climático. Según las estadísticas [1], este sector es responsable de alrededor del 16.2% de las emisiones de CO2 globales y del 25% de las asociadas al uso de fuentes de energía. Dentro de este sector, el transporte por carretera es el mayor contribuyente, ya que representa un 11,19% del total de las emisiones globales, frente al 1,9% que representa el transporte aéreo. Por ello, los esfuerzos para reducir las emisiones del sector a través de la investigación y desarrollo de nuevas tecnologías como el vehículo eléctrico o los biocombustibles son cada vez mayores. La Figura 1 representa la contribución de cada sector a las emisiones globales de gases de efecto invernadero.

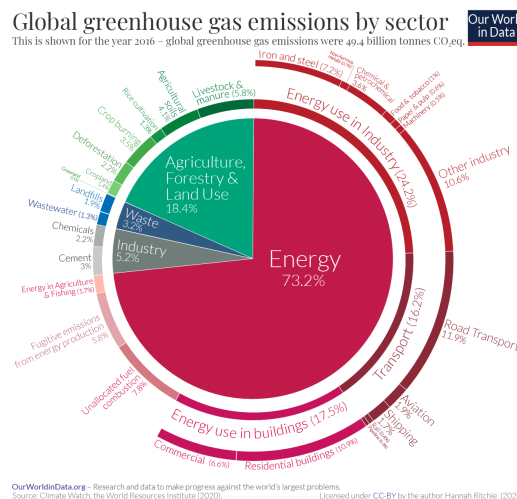


Figura 1: Contribución de los distintos sectores a las emisiones globales de efecto invernadero [1].

El sector de la aviación es difícil de descarbonizar debido principalmente a las grandes cantidades de combustible necesarias para el vuelo y a los altos requerimientos que este debe cumplir con el fin de ser apto para un uso común en aviación. Por ello, el desarrollo de nuevos combustibles sostenibles que sustituyan a los convencionales basados en hidrocarburos, como el queroseno, se dificulta dada la necesidad de adaptar, no sólo el diseño de la planta propulsora, sino también el de la propia estructura de la aeronave, así como la infraestructura global necesaria para surtir a las aeronaves de este combustible.

Los combustibles sostenibles en desarrollo deben tener unas prestaciones a la altura de las

aportadas por los convencionales. De este modo, el sector de la aviación podría reducir drásticamente las emisiones de gases de efecto invernadero manteniendo, o incluso incrementando, las actuaciones de las nuevas aeronaves con respecto a las anteriores.

1.2. Hidrógeno como combustible de aviación

La Unión Europea, al igual que muchas empresas de la industria energética, se ha comprometido a alcanzar unas emisiones neutras de CO₂ en 2050 para así cumplir con el tratado internacional del Acuerdo de París. Esto significa que las cantidades de CO₂ emitidas a la atmósfera deben ser lo suficientemente bajas como para ser absorbidas por sumideros de carbono naturales como la propia vegetación del planeta, de forma que el aumento neto de CO₂ en la atmósfera sea prácticamente nulo. Para lograr este objetivo, el plan de actuación establece que el aumento de temperatura en el planeta debido a las emisiones de gases de efecto invernadero no debería superar los 2°C, límite a partir del cual el planeta puede sufrir consecuencias naturales y climáticas graves. Tal y como muestra la Figura 2, no superar dicho aumento de temperatura sólo es posible si se pretende reducir a 0 las emisiones de gases de efecto invernadero en el próximo siglo, lo cual requiere adoptar unas medidas mucho más restrictivas que las que la mayoría de las naciones del mundo aplican a día de hoy [1].

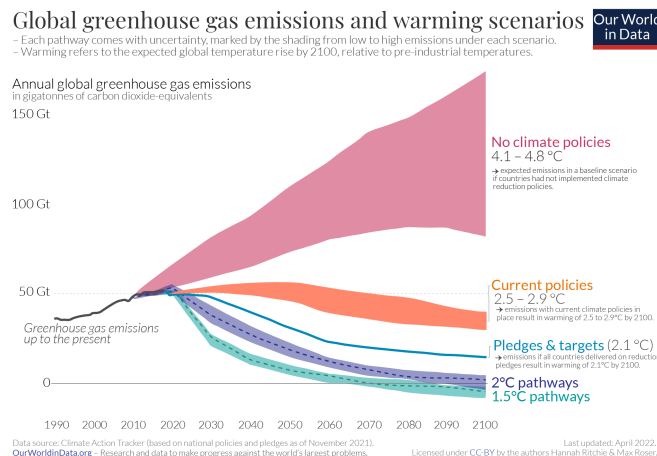


Figura 2: Pronóstico de las emisiones anuales de gases de efecto invernadero para distintos planes de actuación o "pathways". [1]

Dicho esto, aunque existan tecnologías en vías de desarrollo como los SAFs (*Sustainable Aviation Fuels*), que pueden contribuir a la reducción de emisiones netas de CO₂ durante los próximos años, es evidente que para lograr una descarbonización completa de la aviación se necesita recurrir a un combustible sin contenido en carbono, como es el hidrógeno. Aún así, es

importante mencionar que, aunque no existan emisiones de CO₂ en la combustión del hidrógeno, se seguirán generando emisiones contaminantes locales como son los NO_x, aunque en menor proporción. Existen numerosos problemas y debates acerca de la producción e implementación de un hidrógeno 100% sostenible en la industria, pero dicha información queda fuera de los márgenes de este trabajo.

El hidrógeno es un combustible con un alto poder calorífico, casi tres veces mayor al de los combustibles convencionales. Esto supone una reducción en consumo, emisiones y peso del combustible transportado para un mismo aporte de energía. Sin embargo, su principal problema es su baja densidad energética incluso en fase líquida, es decir, la necesidad de un volumen mucho mayor para albergar la misma cantidad de energía en forma de combustible. Como consecuencia, el diseño convencional de depósitos de combustible en el interior de las alas no es eficaz, y obliga a los diseñadores a situarlos en el fuselaje del avión [6]. Además, la necesidad de almacenar el hidrógeno líquido a alta presión o a muy bajas temperaturas dentro de la aeronave dificulta el diseño de los tanques.

1.3. Motivación

Una vez introducidas las características más generales del hidrógeno y su uso en aviación, resulta evidente que se trata de una tecnología en vías de desarrollo y que, por tanto, la investigación, tanto teórica como experimental, de las nuevas plantas propulsivas que usen este combustible es absolutamente necesaria. Nace así la motivación de este trabajo, en el cual se caracteriza la mezcla de aire e hidrógeno en un quemador de flujo continuo mediante herramientas de cálculo CFD, en concreto StarCCM+. El caso estudiado que se presenta en este trabajo se trata de un inyector tipo *swirler* en una cámara de combustión de geometría simplificada, en relación con las que se encuentran hoy en día en motores de aviación. Sin embargo, una geometría simple permite reproducir el caso de forma experimental para validar los resultados obtenidos con mayor certeza. Los resultados, aunque lejos de poder aplicarse directamente a un aeroreactor, resultan útiles para el diseño de los múltiples inyectores tipo *swirler* que suelen encontrarse en él.

A lo largo de este documento se detallarán las particularidades de los sistemas de inyección de combustible, así como todo el marco teórico que engloba al estudio de mecánica de fluidos computacional que se ha realizado. Finalmente, se expondrán y analizarán los resultados de dicho estudio.

1.4. Objetivos

Como ya se ha mencionado, el objetivo general de este trabajo es estudiar y caracterizar la mezcla de aire e hidrógeno en un quemador de flujo continuo mediante una simulación CFD y obtener información relevante de cara a una posible aplicación experimental. Para ello, han de alcanzarse diversos objetivos específicos:

- Conocer los conceptos físicos y tecnológicos más relevantes en relación con la inyección de combustible en turbinas de gas.
- Seguir una correcta metodología de estudio CFD, conociendo los modelos físicos empleados en este tipo de software y las limitaciones del mismo.
- Configurar en StarCCM+ un caso de estudio que reproduzca con toda la fidelidad posible el proceso de inyección y que, a su vez, no suponga un coste computacional excesivo.
- Crear una o varias rutinas de post-proceso con las que automatizar la evaluación de los resultados obtenidos en la simulación.
- Estudiar el proceso transitorio de inyección de hidrógeno y determinar el instante en el que dicho proceso se vuelve estacionario.
- Validar los resultados obtenidos.
- Interpretar los resultados obtenidos de cara al diseño óptimo del quemador.

2. Fundamentos de la inyección de combustible en aeroreactores

2.1. Conceptos generales

En los próximos apartados se pretende introducir al lector todos los conceptos teóricos y tecnológicos necesarios para una mejor comprensión del caso de estudio.

Antes de continuar, cabe resumir el funcionamiento básico de un aeroreactor, ilustrado en la Figura 3 como un simple ejemplo de motor turbojet. En primer lugar, el aire de la atmósfera que entra al motor atraviesa un difusor cuya función es disminuir la velocidad del aire. Tras él, el compresor, a través de sus múltiples escalonamientos, aporta al fluido un aumento de presión y temperatura. En la cámara de combustión, el aire a alta presión debe ser mezclado y quemado con el combustible transportado. Los gases producto de la combustión, a alta temperatura, viajan hacia las etapas de turbina para generar la potencia mecánica necesaria para mover el compresor a través de un eje y para generar potencia auxiliar. Finalmente, los gases calientes se expanden y son acelerados en una tobera, generando empuje a la salida de la misma.

De todos estos componentes principales, este trabajo pone el foco de atención en uno de ellos, la cámara de combustión y, especialmente, su sistema de inyección de combustible. La teoría que engloba al diseño completo de una cámara de combustión resulta muy extensa y se encuentra desarrollada en la bibliografía [7] [8] [9]. De dicha bibliografía se ha extraído aquella información que resulta relevante para este apartado.

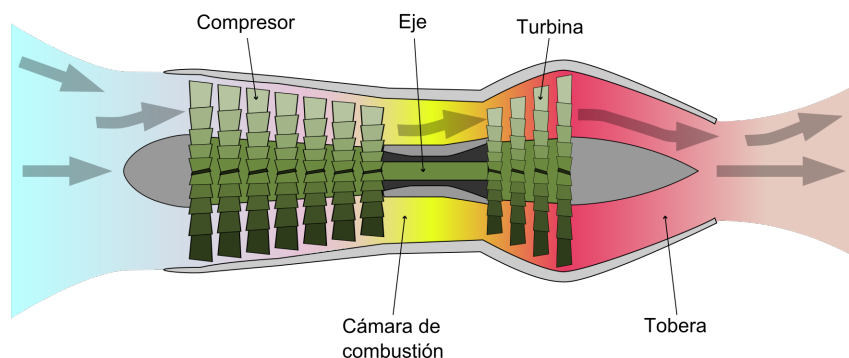


Figura 3: Esquema simplificado de un motor turbojet [2].

2.2. Cámara de combustión

El diseño de la cámara de combustión tiene como objetivo aportar la mayor cantidad de calor al fluido de trabajo evitando unas pérdidas de presión excesivas. La clasificación principal de cámaras de combustión viene dada por la disposición de sus distintos quemadores. De esta forma, tal y como se ilustra en la Figura 4, se clasifican en: tubular, tubo-anular y anular. Las cámaras anulares se encuentran más a menudo en diseños actuales dada su gran eficiencia y reducido peso, pero eso no significa que las cámaras tubulares hayan caído en desuso.

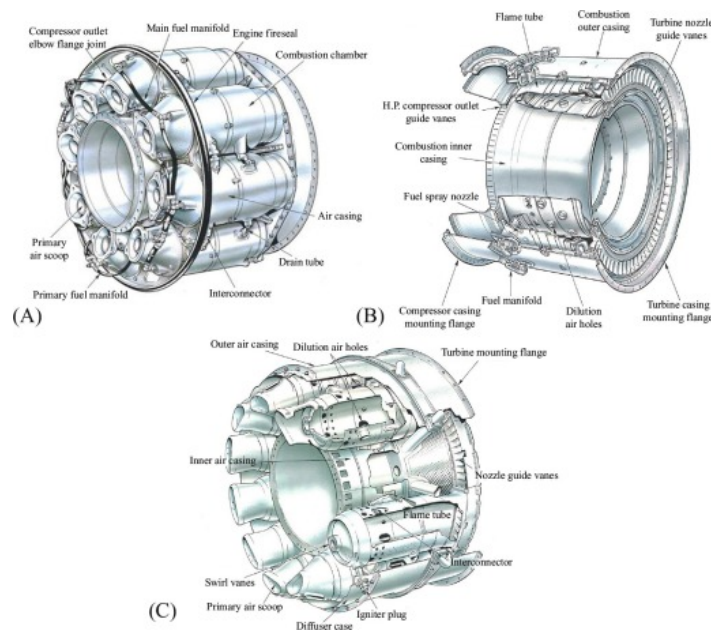


Figura 4: Tipos de cámara de combustión según su disposición: A) tubular, B) anular, C) tubo-anular

Las cámaras de combustión aeronáuticas deben tener un amplio rango de operación y mantener una eficiencia elevada. La temperatura de los gases de combustión oscila generalmente entre 800°C y 1700°C y, además, está limitada por las propiedades de los materiales que forman la primera etapa de turbina. Los álabes de turbina están sometidos a elevadas cargas aerodinámicas, a altas temperaturas y a deposiciones de sustancias corrosivas, por lo que sus actuaciones tienen un límite.

Se define a continuación el diseño convencional de la cámara de combustión y la distribución habitual del aire a través de la misma, ilustrados en las Figuras 5 y 6.

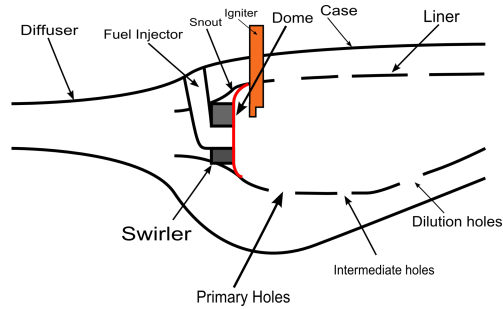


Figura 5: Esquema simplificado de los elementos de una cámara de combustión [3].

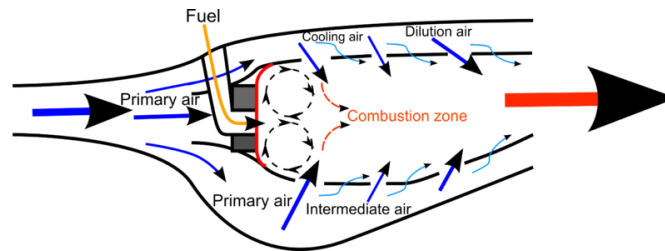


Figura 6: Esquema simplificado del flujo de aire y combustible en una cámara de combustión [4].

Elementos de la cámara de combustión

- Carcasa: es el armazón exterior que encierra el tubo de llama. Soporta las presiones de los gases de combustión
- Tubo de llama: es la estructura en cuyo interior se produce la combustión.
- Inyector: permite introducir el combustible en la cámara de combustión, adecuadamente preparado, para favorecer su mezcla con el aire.
- Torbellinador o *swirler*: se trata de un pequeño estátor a la entrada del aire, que permite reducir algo su velocidad al mismo tiempo que lo hace rotar para mejorar su mezcla con el combustible.
- Bujías: realizan el encendido de la mezcla. Con una bujía en principio sería suficiente, aunque por seguridad se suelen colocar dos.

A su vez, respecto a la distribución del aire en la cámara de combustión, se distinguen tres zonas:

Zona primaria Tal y como se observa en la Figura 6, el aire entrante a la cámara se divide en una corriente de aire primario, que entra directamente al tubo de llama, y el aire intermedio y de dilución, que se inyectan posteriormente en la llama. El aire primario corresponde al 15-20% del total y es inyectado alrededor de la inyección de combustible a través del *swirler*. En esta zona, se encuentra una mezcla relativamente rica en combustible para generar una elevada temperatura y asegurar una rápida combustión. El aire en esta zona se inyecta creando unos remolinos que atrapan y recirculan los gases calientes de la combustión, estabilizando la formación de la llama, evitando el soplado de llama y favoreciendo la mezcla.

Zona secundaria o intermedia. Un 40% del aire admitido es inyectado en esta zona posterior a la zona primaria. Su función principal es completar la combustión de la mezcla rica en combustible proveniente de la zona primaria. Además, la inyección del aire a baja temperatura alrededor de la llama ayuda a alejarla de las paredes y disminuir su temperatura. Su diseño es crítico para evitar un apagado de llama.

Zona terciaria o de dilución. Tras haber completado la combustión, se inyecta aire en esta zona con el objetivo de disminuir la temperatura de la mezcla antes de entrar en la turbina.

2.3. Preparación del combustible

En todo tipo de plantas propulsivas la preparación del combustible es de gran importancia. Esto incluye tanto el almacenamiento de combustible en tanques como su tratamiento previo a la inyección. En el caso de combustibles de aviación convencionales, como el queroseno, estos pueden almacenarse en depósitos situados típicamente en el interior de las alas de la aeronave. Los depósitos se encuentran presurizados lo suficiente como para lograr que el combustible sea inyectado correctamente en el interior de la cámara de combustión.

Por otro lado, al trabajar con hidrógeno, dado el gran volumen ocupado por este combustible en estado gaseoso, es necesario almacenarlo en fase líquida, lo cual requiere ciertas adaptaciones. Para permanecer licuado, el hidrógeno debe encontrarse a alta presión y a muy baja temperatura. Dada la dificultad de refrigerar el combustible hasta esas temperaturas ($<-250^{\circ}\text{C}$), una opción es aumentar la presión de los tanques para que el hidrógeno permanezca licuado a mayor temperatura. Sin embargo, esto implica que los tanques deberán ser más resistentes y consecuentemente más pesados.

Además, tal y como se demuestra en la bibliografía del trabajo [10] [11], la inyección de combustible a baja temperatura repercute negativamente en las prestaciones del motor. Por ello, una alternativa viable es el uso de un intercambiador de calor previo a la inyección que aumente la temperatura del combustible. Tras calentarse, el hidrógeno se encuentra en fase gaseosa y es inyectado en la cámara.

La principal particularidad de la inyección de combustible en estado gaseoso es la ausencia de un mecanismo para atomizar el combustible. Es decir, no es necesario estudiar la formación y evaporación de las gotas características del combustible líquido. Si el hidrógeno se inyecta directamente en estado gaseoso, la mezcla depende únicamente del proceso de difusión entre el combustible y el aire.

2.4. Descripción del caso de estudio

El caso estudiado en este trabajo se trata del quemador ilustrado en la Figura 8, formado por una cámara de distribución o plenum previo a la inyección, un inyector tipo *swirler*, una cámara de combustión rectangular donde se mezclarán los gases y un conducto convergente de escape por el que se evacúa la mezcla. El diseño del inyector corresponde al realizado por el laboratorio CORIA (*Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie*) en el marco del proyecto europeo KIAI (*Knowledge for Ignition, Acoustic and Instabilities*), y tratado en la tesis doctoral de M. D. Barre [5], la cual sirve como guía de referencia en este trabajo. Este inyector, ilustrado en la Figura 7, consiste en una corona de 18 conductos dispuestos en forma de torbellino situados tras la cámara de distribución de aire. La geometría de los conductos aporta al aire entrante un movimiento de *swirl* antes de salir hacia la cámara de combustión con una inclinación de 45° .

Los inyectores tipo *swirler* son ampliamente utilizados en cámaras de combustión de turbinas de gas, por lo que existen numerosos estudios numéricos y experimentales acerca del comportamiento del flujo durante su proceso de inyección [5] [12] [13]. Así pues, la estructura del flujo se divide en 3 zonas principales ilustradas en la Figura 7. El intenso movimiento de *swirl* del aire entrante genera una caída de presión en la zona central de la mezcla, provocando así una zona de recirculación interior aguas arriba llamada IRZ (*Inner Recirculation Zone*). Por otro lado, la recirculación de la mezcla en las esquinas inferiores, CRZ (*Corner Recirculation Zone*), domina el fenómeno de expansión del flujo entrante a la cámara. Como consecuencia de todo, en las proximidades de la inyección central se encuentra una región de elevada vorticidad

llamada PVC (*Precessing Vortex Core*), donde los esfuerzos viscosos resultan muy elevados e incluso pueden encontrarse puntos de estancamiento en los que la velocidad del flujo es nula [14] [15].

Todas estas zonas de recirculación resultan beneficiosas para el proceso de combustión. La recirculación aguas arriba de la mezcla otorga estabilidad en la formación y anclaje de la llama, evitando que se desplace excesivamente aguas abajo. También, las grandes estructuras turbulentas favorecen el transporte de calor desde los gases calientes ya quemados hacia el flujo entrante. Además, la recirculación provoca un mayor tiempo de residencia de la mezcla en la cámara, por lo que es más fácil realizar una combustión completa. Sin embargo, si la turbulencia en estas zonas resulta demasiado intensa, puede afectar negativamente al funcionamiento del quemador. Una turbulencia muy intensa puede imposibilitar la ignición de la mezcla, provocar la recirculación de gases calientes hacia dentro del inyector ("*flashback*") o romper la estructura definida del flujo, dando lugar a inestabilidades en la combustión [16].

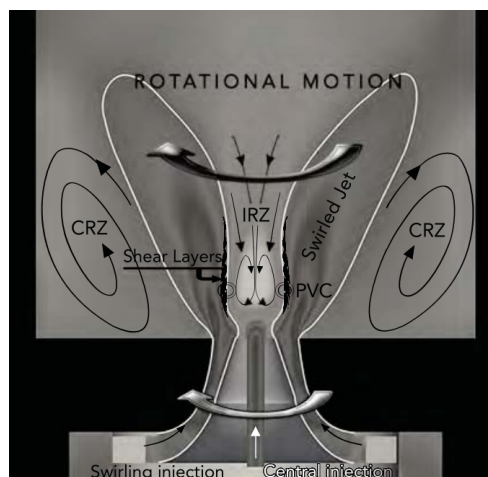


Figura 7: Estructura habitual del flujo en inyectores tipo *swirler* [5].

En cuanto a sus dimensiones, el combustible se inyecta a través de un orificio de diámetro $d = 4mm$, mientras que el aire se inyecta en la cámara por un orificio anular con un diámetro exterior $D = 20mm$ que rodea la inyección de combustible. La cámara de combustión tiene una sección prácticamente cuadrada (sus aristas se suavizan añadiendo caras adicionales) de 100 mm de lado, con una longitud de cámara $L = 260mm$. Los planos detallados de la geometría del quemador se encuentran en el Documento II: Planos. La razón de este diseño es la instalación de ventanas de cuarzo sintético en las caras rectangulares de la cámara para tener acceso óptico al proceso de combustión.

Tal y como se observa en la Figura 8, el aire será sustituido por nitrógeno, un gas inerte

que, aunque exista aporte de calor, no reaccionará con el hidrógeno inyectado. Esto resulta beneficioso a la hora de estudiar experimentalmente el flujo frío, ya que muchas técnicas de medida ópticas como el PIV (*Partible Image Velocimetry*) suponen un aporte de calor mediante haces láser que podría provocar la ignición de la mezcla de hidrógeno y aire. Además, las propiedades del aire exterior son irregulares y difíciles de determinar, mientras que las del nitrógeno gaseoso embotellado son bien conocidas, lo que permite validar de forma más precisa el estudio CFD realizado. Aproximadamente el 78% de la composición del aire corresponde al nitrógeno, por lo que no se espera que los resultados varíen en exceso con respecto al aire.

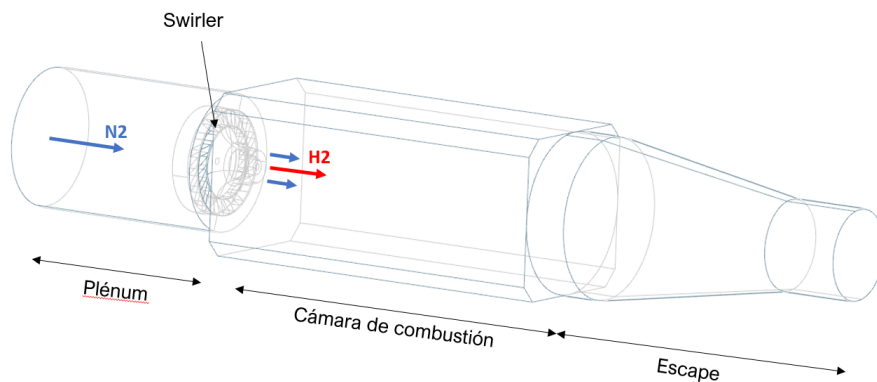


Figura 8: Geometría del quemador experimental "KIAI burner".

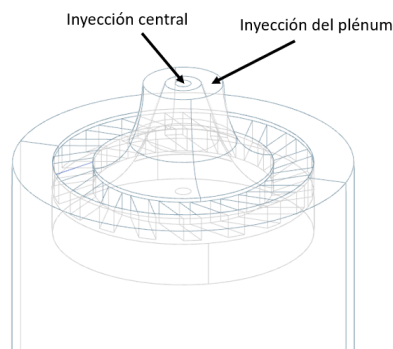


Figura 9: Geometría del inyector.

3. Metodología CFD

En este apartado se desarrollan aquellos conceptos teóricos relativos al preproceso, cálculo y postproceso del estudio CFD realizado. La mecánica de fluidos es una disciplina compleja, especialmente en aquellos casos en los que la turbulencia del flujo es determinante en el proceso estudiado, tal y como ocurre en este caso de estudio. Por ello, los programas de cálculo CFD cuentan con complejos *solvers* desarrollados para agilizar la computación e intentar simular con precisión un proceso termofluidodinámico real. Sin embargo, el usuario de este software debe ser conocedor de los fundamentos del cálculo computacional y de los modelos físicos de los que se hacen uso para, así, realizar un preproceso adecuado y obtener unos resultados válidos sin un coste computacional excesivo.

3.1. Fundamentos

El cálculo CFD se basa en la discretización del dominio en un conjunto de volúmenes finitos denominado "malla". En cada elemento de esta malla deben resolverse todas las variables termofluidodinámicas a partir de unas condiciones de contorno y unas condiciones iniciales. Además, aplicando modelos físicos a estos volúmenes finitos, es posible simular procesos tales como la turbulencia o la disipación molecular.

3.1.1. Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes resultan fundamentales en cualquier problema de mecánica de fluidos. Estas ecuaciones se aplican a un volumen de control finito en el cual, independientemente de los procesos que se lleven a cabo en su interior, se debe cumplir la conservación de las distintas magnitudes que dan nombre a las ecuaciones.

Conservación de la masa La ecuación de conservación de la masa o de continuidad establece que, en un volumen de control determinado, la masa entrante al sistema debe ser igual a la masa saliente más el término acumulativo. Si se escribe dicha ecuación en forma diferencial y en las tres dimensiones, queda descrita como la Ecuación 1.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \quad (1)$$

Donde ρ es la densidad del fluido y (u, v, w) corresponde a las componentes de la velocidad en las tres direcciones (x, y, z) respectivamente.

Conservación de la cantidad de movimiento De acuerdo con la segunda ley de Newton, la variación de la cantidad de movimiento en un elemento fluido es equivalente a la fuerza neta que actúa sobre el mismo. Las fuerzas pueden ser másicas si actúan por igual sobre todas las partículas contenidas en el interior del volumen de control, como la gravedad, o de superficie si solo actúan en las superficies que delimitan al volumen, como las fuerzas de presión. Así pues, la variación de la cantidad de movimiento en las tres dimensiones se describe en las ecuaciones 2, 3 y 4.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{Mx} \quad (2)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nabla \cdot (\mu \nabla v) + S_{My} \quad (3)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \nabla \cdot (\mu \nabla w) + S_{Mz} \quad (4)$$

Donde el término $(\mu \nabla w)$ se deriva de las fuerzas viscosas que actúan sobre el volumen de control, $-\frac{\partial p}{\partial x}$ corresponde al término de fuerzas de presión y S_M es el término de fuerzas másicas.

Conservación de la energía Tal y como establece el primer principio de la termodinámica, la variación de energía dentro de un sistema se deberá únicamente a la suma del calor intercambiado con su entorno y el trabajo que realice. Esto se aplica de igual forma a un volumen de control finito, de forma que todas las fuentes o sumideros de energía quedan agrupados en la Ecuación 5.

$$\begin{aligned} \rho \frac{DE}{Dt} = & -\nabla \cdot (\rho \vec{u}) + \left[\frac{\partial u \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial u \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial u \tau_{zx}}{\partial z} + \frac{\partial v \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v \tau_{yy}}{\partial y} + \dots \right. \\ & \left. \dots + \frac{\partial v \tau_{zy}}{\partial z} + \frac{\partial w \tau_{xz}}{\partial z} + \frac{\partial u \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial u \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \nabla \cdot (k \nabla T) + S_E \end{aligned} \quad (5)$$

Donde $\frac{DE}{Dt}$ es la variación de la energía interna del elemento fluido con el tiempo, τ_{ij} representa los esfuerzos viscosos, $\nabla \cdot (k \nabla T)$ es el término de intercambio de calor por conducción y S_E representa el término fuente de generación de calor.

Conservación de las especies En problemas de interacción entre dos o más sustancias fluidas distintas, cada elemento de la malla podrá contener a cualquiera de las especies. Esta ley establece que en el interior del volumen finito debe cumplirse un balance entre acumulación, emisión y producción de masa de cada especie. La fracción másica de una especie Y_i en un elemento se define en la ecuación 6:

$$Y_i = \frac{M_i}{M} = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (6)$$

Donde M_i y ρ_i son la masa y la densidad de la especie i respectivamente. De ese modo, la conservación de la especie i en forma diferencial queda descrita en la ecuación 7:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) + S_i \quad (7)$$

3.1.2. Esquemas de discretización

El principio fundamental del cálculo CFD reside en la no-continuidad tanto espacial como temporal del campo fluido. En otras palabras, no es posible resolver un medio continuo con herramientas de cálculo computacional. En su lugar, el campo fluido es discretizado espacial y temporalmente, y dependiendo de la resolución con la que se discretice, los procesos serán reproducidos con mayor o menor precisión.

Dada la naturaleza tridimensional de la turbulencia, fenómeno dominante en el proceso de inyección estudiado, se ha recurrido a establecer un dominio tridimensional discretizado según el Método de los Volúmenes Finitos (FVM). En este método, los volúmenes de control creados, cuya forma es habitualmente polihédrica, son a su vez discretizados en distintos puntos: su centroide y sus vértices. Las variables serán calculadas en el centroide de cada volumen de control e interpoladas en sus vértices. Cada uno de estos volúmenes finitos son comúnmente conocidos como "celdas", y todo su conjunto en el dominio se conoce como "malla". La Figura 10 ilustra las distintas morfologías que estas celdas pueden adaptar. La elección en este caso de una malla polihédrica se debe a la facilidad de este tipo de elementos para adaptarse a geometrías complejas y a su menor coste computacional.

Respecto a la discretización temporal, esta debe garantizar la estabilidad de la solución. El paso temporal entre un instante resuelto y otro debe concordar con los tiempos de propagación característicos del problema. Así pues, el paso temporal establecido para esta simulación es $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5}$ s.

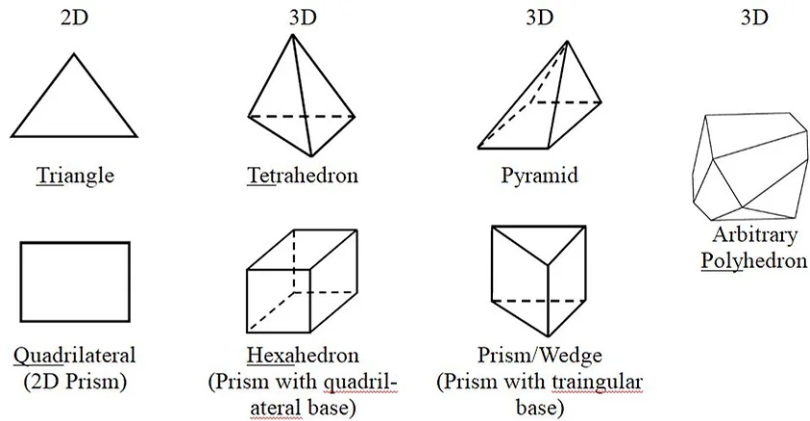


Figura 10: Tipos de celdas según su topología.

3.1.3. Modelado de la turbulencia

La turbulencia es un fenómeno encontrado en la mayoría de casos en los que se estudia el movimiento de un fluido. En un flujo laminar el campo de velocidades del fluido viene determinado por su viscosidad y resulta resoluble analíticamente y constante con el tiempo. Por otro lado, un flujo turbulento se caracteriza por unas fluctuaciones aleatorias en el campo fluido y por la formación de estructuras turbulentas de distinto tamaño llamadas "vórtices" o "torbellinos". La Figura 11 ilustra la comparación entre estos dos tipos de flujo.

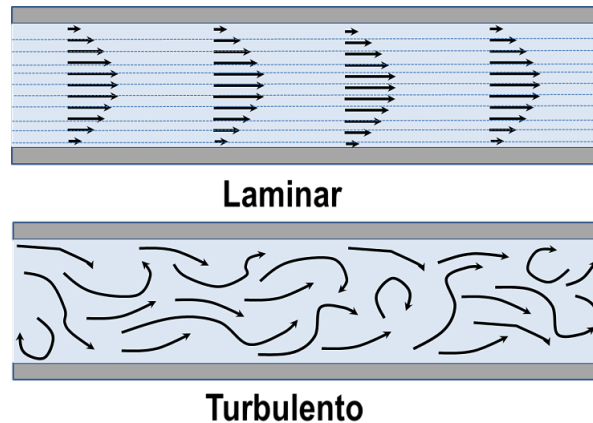


Figura 11: Esquema de un flujo laminar frente a a un flujo turbulento.

El número de Reynolds es un parámetro adimensional utilizado para determinar si un flujo es laminar o turbulento, y se define en la Ecuación 8:

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \quad (8)$$

Donde u es la velocidad característica del flujo, L la longitud característica, y μ la viscosidad dinámica del fluido.

De esta forma, el número de Reynolds mide la relevancia entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas que actúan sobre el fluido. En un flujo a través de una tubería, por ejemplo, la velocidad característica sería la velocidad promedio en su interior y su longitud característica correspondería al diámetro de la tubería. Así pues, por lo general, si el número de Reynolds Re se encuentra por encima de 4000, el flujo será turbulento. Además, para ciertos casos de estudio en los que el Re sea muy elevado, y si procede, se podrán despreciar los efectos viscosos.

A continuación, se describen los distintos enfoques que existen en CFD para tratar de resolver, o en su defecto modelar, los efectos turbulentos del flujo. Cabe destacar que el modelado de la turbulencia supone un coste computacional adicional en la simulación, por lo que para cada caso de estudio se debe evaluar previamente la relevancia de este tipo de fenómenos.

- **RANS (*Reynolds Average Navier Stokes*)**

Se trata del enfoque más ampliamente utilizado debido a su bajo coste computacional y a su efectividad en determinadas aplicaciones. Los modelos RANS no resuelven detalladamente las estructuras turbulentas, sino que aplican un modelo de turbulencia a cada uno de los elementos del dominio para simular los efectos que la turbulencia tendría sobre el campo fluido. En RANS, se considera que las propiedades turbulentas del flujo pueden ser representadas como promedios estadísticos a lo largo del tiempo, por lo que sus modelos no son aplicables al estudio de procesos transitorios. Existen distintos modelos para simular los efectos de la turbulencia, los cuales suponen ecuaciones adicionales a las ecuaciones de Navier-Stokes tratadas previamente. Por ejemplo, el modelo $k - \epsilon$ permite dar una solución aproximada a la energía cinética turbulenta (k) y a la disipación de energía turbulenta (ϵ) para así resolver el resto de variables turbulentas.

- **LES (*Large Eddy Simulation*)**

Las simulaciones LES ofrecen un enfoque más detallado de la turbulencia, ya que, a diferencia de RANS, las estructuras turbulentas no se modelan como un promedio con el tiempo, sino que se resuelven de manera directa. Sin embargo, dichas estructuras turbulentas se resuelven con un cierto nivel de detalle o resolución espacial establecido por el usuario. Así pues, las simulaciones LES se encuentran a medio camino entre RANS y DNS (*Direct Numerical Simulation*), puesto que, a pesar de resolver directamente las

estructuras turbulentas de mayor tamaño a partir de las ecuaciones de Navier Stokes, los efectos de las escalas turbulentas más pequeñas deben ser modelados. Cabe destacar que estas simulaciones también suponen un coste computacional notablemente mayor que en RANS dada su mayor resolución espacial.

La razón por la que un enfoque LES resulta útil reside en el concepto de "Cascada de energía turbulenta", el cual describe la forma en la que la energía cinética turbulenta se transfiere desde las escalas turbulentas más grandes a las más pequeñas, y acaba disipándose en forma de calor. Tal y como se muestra en la Figura 12, en la cual el parámetro k (número de onda) queda definido como la inversa del tamaño del torbellino, la mayor parte de la energía cinética turbulenta reside en las escalas de mayor tamaño. Por esta razón, tal y como se observa en la zona inferior de la imagen, las simulaciones LES pretenden resolver un rango de escalas lo suficientemente amplio como para resolver la mayor parte de la energía cinética turbulenta.

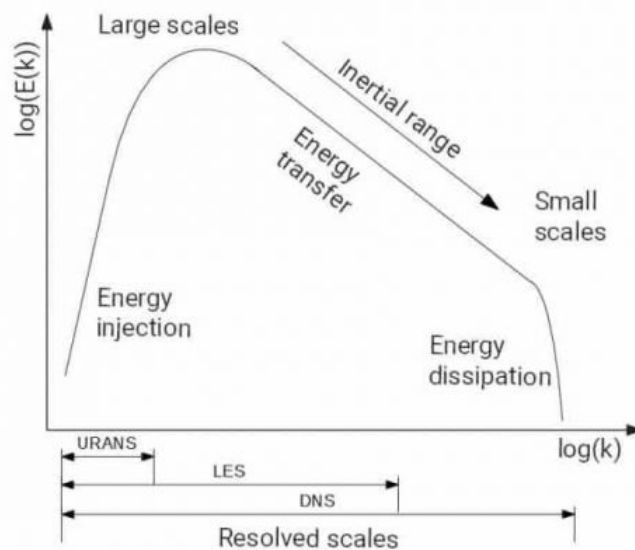


Figura 12: Diagrama de la distribución de energía cinética turbulenta (E) en función del número de onda k .

Dicho esto, un factor determinante en la calidad y validez de la simulación LES realizada es la definición del tamaño a partir del cual la turbulencia no será resuelta numéricamente, sino modelada. Todas las escalas de tamaño igual o inferior al filtro que se haya establecido caerán dentro de la *Sub-Grid Scale* (SGS), y su efecto será simulado mediante modelos SGS tales como el modelo Smagorinsky, el modelo dinámico de subescala o el modelo

WALE (*Wall-Adapting Local Eddy-viscosity*).

Volviendo a la Figura 12, se observa que el rango de resolución en LES abarca la formación de las escalas turbulentas más grandes y su transferencia de energía a escalas algo más pequeñas. Sin embargo, el proceso de disipación de los vórtices más pequeños queda fuera de su rango de resolución, por lo que los modelos SGS serán los encargados de modelar este proceso, el cual se encuentra dominado por la viscosidad turbulenta. Por ello, la principal función de un modelo SGS es determinar la viscosidad turbulenta ν_{sgs} . Cada modelo se distingue en ciertas particularidades que lo hacen adecuado para determinados casos, en el caso de estudio de este trabajo se ha hecho uso del modelo WALE.

El modelo SGS WALE posee las mismas bases que el modelo Smagorinsky, el cual establece una relación entre ν_{sgs} , la tasa de deformación local S_{ij} (obtenida a partir del campo de velocidades), el tamaño del filtro Δ y el coeficiente de Smagorinsky C_s según la ecuación 9. De esta forma, el proceso de disipación de los torbellinos queda controlado por el coeficiente de Smagorinsky C_s , el cual debe ser correctamente determinado.

$$\nu_{sgs} = (C_s \cdot \Delta)^2 \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (9)$$

Sin embargo, el modelo WALE añade al modelo de Smagorinsky la influencia de la distancia a las paredes y las características locales del flujo cerca de las mismas. Esto lo hace un modelo más adecuado para flujos confinados en tuberías o conductos, en los cuales la influencia de las paredes en la formación de estructuras turbulentas resulta relevante.

- DNS (*Direct Numerical Simulation*)

Las simulaciones DNS se caracterizan por hacer uso de una malla computacional lo suficiente refinada como para resolver todas las escalas turbulentas, incluso las más pequeñas. Por ello, a diferencia de en LES, se resuelven todos los efectos de la turbulencia sin hacer uso de modelos SGS. Aun así, el coste computacional de este tipo de simulaciones resulta muy elevado, teniendo que recurrir a supercomputadores para simular procesos de unos segundos de duración en un tiempo razonable.

La Figura 13 muestra una comparación del nivel de detalle resuelto por cada uno de los enfoques descritos en este apartado.

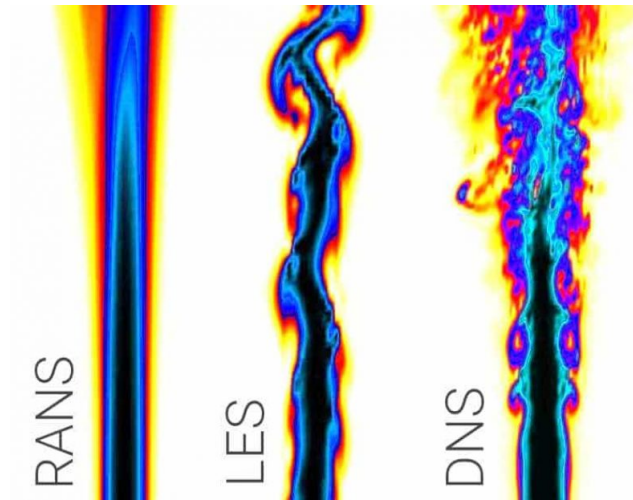


Figura 13: Comparativa del nivel de detalle de la turbulencia resuelto por los enfoques RANS, LES y DNS.

3.2. Preproceso

Tras introducir los fundamentos en los que se basan las herramientas de cálculo CFD, el preproceso consiste en establecer aquellos modelos y estrategias de mallado adecuados para, en la medida de lo posible, conseguir unos resultados precisos. En esta fase del estudio CFD es importante contar con documentación acerca de estudios similares al realizado [17], ya que hasta no disponer de datos experimentales con los que validar un estudio CFD, los modelos de los que se haga uso no aseguran unos resultados verídicos. En los próximos apartados se describe la adaptación del caso de estudio al software CFD utilizado, en este caso *StarCCM+*. Cabe mencionar que todos los ejemplos mostrados en este apartado, previo al Apartado 4, corresponden con el caso base de estudio, y no tienen por qué ser adecuados ni definitivos.

3.2.1. Malla computacional

Una vez importada la geometría del quemador, descrita en el Apartado 2.4, el dominio computacional queda definido como la región encerrada en el interior de sus paredes. El campo fluido será resuelto en todo el dominio computacional y, como ya se ha establecido previamente, dicho dominio es discretizado en un número finito volúmenes denominado "malla". El número de elementos que componen la malla repercute en el coste computacional de la simulación, ya que las ecuaciones de Navier-Stokes deberán ser resueltas en cada uno de ellos. Por otro lado, el tamaño de los elementos determina la resolución espacial del cálculo, de modo que será necesaria una malla más refinada para resolver aquellas regiones con numerosos gradientes en las propiedades del fluido. Además, el tamaño de los elementos también define el tamaño mínimo de las escalas turbulentas resolubles en el campo fluido, es decir, define el filtrado de las escalas turbulentas en simulaciones LES, tal y como se ha explicado en el Apartado 3.1.

Así pues, para planear una buena estrategia de mallado, la malla debe encontrarse refinada en aquellas regiones donde la turbulencia resulte más intensa y relevante, para así simular lo mejor posible los efectos de la turbulencia en la región de interés. A su vez, para evitar un coste computacional excesivo, los elementos de la malla deberán ser de mayor tamaño en aquellas regiones del dominio que no resulten tan relevantes para la obtención de resultados, sacrificando así la calidad de la solución en dichas regiones. La malla utilizada se encuentra ilustrada en la Figura 14, junto a los detalles acerca del refinamiento en sus distintas regiones (1, 2, 3 y 4) en la Tabla 1. El número total de elementos en la malla resulta de 3.01 millones.

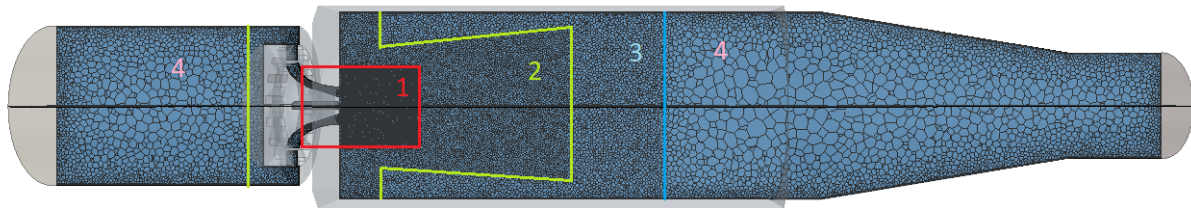


Figura 14: Malla computacional establecida para el caso de estudio.

Región de mallado	Tamaño de elemento	% respecto a tamaño base
Región 1	0.2 mm	10 %
Región 2	0.8 mm	40 %
Región 3	1.4 mm	70 %
Región 4	2 mm	100 %

Tabla 1: Tamaño de elementos en las distintas regiones de la malla polihédrica empleada.

3.2.2. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno se imponen en los límites del dominio computacional, es decir, aquellas superficies que encierran al campo fluido. Se tratan de restricciones constantes con el tiempo en las propiedades del fluido que permiten resolver el interior del dominio. Así pues, cada una de las superficies que delimitan la geometría del quemador corresponde a una condición de contorno.

Existen distintos tipos de condiciones de contorno dependiendo de las variables que se impongan. El criterio para escoger dichas variables depende del estudio a realizar, teniendo en cuenta que dichas imposiciones deben concordar con el caso real. Por ello, las condiciones de contorno en este caso consistirán en imponer un flujo másico constante en la entrada de nitrógeno (N₂) ("*plenum injection*") y en la entrada de hidrógeno (H₂) ("*central injection*"). Por otro lado, en la condición de contorno correspondiente al escape de la mezcla de gases ("*outlet*") se impondrá una presión constante e igual a la presión atmosférica. El resto de las superficies serán modeladas como paredes adiabáticas dada la poca relevancia de la transferencia de calor en el flujo frío. Los detalles acerca de cada condición de contorno impuesta en el caso base se describen en las Tablas 2, 3, 4 y 5.

Central inlet	
\dot{m}_{H_2} [kg/s]	$2,36 \cdot 10^{-4}$
T [K]	300
p [Pa]	101325
Y_{H_2} [-]	1
Y_{N_2} [-]	0

 Tabla 2: Condiciones de contorno en la inyección de H₂.

Plenum inlet	
\dot{m}_{H_2} [kg/s]	$56,12 \cdot 10^{-4}$
T [K]	300
p [Pa]	101325
Y_{H_2} [-]	0
Y_{N_2} [-]	1

 Tabla 3: Condiciones de contorno en la inyección de N₂.

Outlet	
p [Pa]	101325
T [K]	44

Tabla 4: Condiciones de contorno en la sección de escape.

Paredes	
T [K]	300
Especificación	Adiabática sin deslizamiento

Tabla 5: Condiciones de contorno en las paredes del quemador.

3.2.3. Condiciones iniciales

El proceso de inyección de combustible en la cámara de combustión tiene un comportamiento transitorio desde el inicio hasta el instante en que la llama se estabiliza. A partir de ese momento, el flujo se considera estacionario y es posible extraer información relevante de este. El software CFD debe partir de unas condiciones iniciales para calcular los próximos instantes temporales.

En este caso, se considerarán unas condiciones iniciales idénticas en todo el dominio. La única sustancia inicialmente contenida en los elementos del dominio será el N₂, el fluido se encontrará en reposo y a condiciones ambiente, tal y como describe la Tabla 6.

Condiciones iniciales del dominio	
Y_{H_2} [-]	0
Y_{N_2} [-]	1
T [K]	300
p [bar]	101325
M [-]	0

Tabla 6: Condiciones iniciales del dominio

3.3. Postproceso

Es postproceso es la fase del estudio correspondiente a la extracción, interpretación y validación de los resultados obtenidos por la herramienta de cálculo utilizada. Si la cantidad de datos a extraer y analizar resulta muy grande, es necesario agilizar el proceso creando rutinas de postproceso para analizar con rapidez los resultados obtenidos. Este apartado desarrolla los métodos de análisis de los resultados y los criterios establecidos para la validación de los mismos.

3.3.1. Análisis transitorio del proceso de inyección

El proceso de inyección de hidrógeno en la cámara de combustión y su mezcla con el nitrógeno posee un comportamiento transitorio al comienzo del mismo. Las distintas estructuras turbulentas formadas al inicio de la inyección resultan muy variables con el tiempo, por lo que no es posible extraer información relevante de cara a la operación continua del quemador. La turbulencia es un fenómeno intrínsecamente transitorio en el tiempo. Sin embargo, a partir de cierto instante, el proceso de inyección se volverá lo suficientemente repetitivo e invariable como para ser tratado de "estacionario"[18].

Para conseguir determinar el instante en el cual el proceso se vuelve estacionario se ha optado por analizar la evolución temporal de ciertas magnitudes del flujo. Dichas magnitudes se registrarán en 4 puntos distintos cercanos a la zona de inyección, los cuales quedan ilustrados en la Figura 15 y descritos en la Tabla 7.

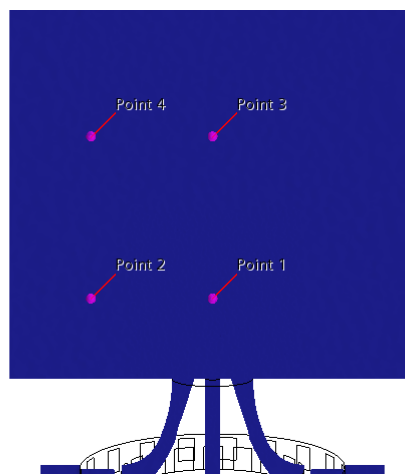


Figura 15: Puntos de análisis del proceso transitorio situados en el dominio.

Punto	x	y	z
1	0	0	D
2	0	$1,5D$	D
3	0	0	$3D$
4	0	$1,5D$	$3D$

Tabla 7: Localización de los puntos de análisis del proceso transitorio.

Así pues, en cada uno de los puntos se registrarán varias señales correspondientes a la evolución de distintas variables con el tiempo. Las variables a analizar en este caso serán el módulo de la velocidad U , la concentración de hidrógeno $[H_2]$ y la presión relativa $\Delta P = p - p_{amb}$. Dado que la turbulencia del flujo supone fluctuaciones temporales en las propiedades del fluido, las señales registradas tendrán un comportamiento oscilatorio. La Figura 16 muestra el ejemplo de una de estas señales.

A continuación, estableciendo ventanas temporales de análisis (V_1 , V_2 y V_3) tal y como se muestra en la Figura 16, la señal puede dividirse en tres conjuntos de datos distintos. Así pues, analizando estadísticamente las distintas ventanas, si no existen diferencias significativas entre los promedios de las ventanas V_1 , V_2 y V_3 , puede concluirse que el proceso es estacionario en todo el ancho de la ventana V_1 . Todas las ventanas finalizan en el instante final del tiempo simulado, por lo que el instante inicial de V_1 determina el tiempo mínimo a partir del cual el proceso es estacionario. Si el primer punto de V_1 disminuye hasta un instante por debajo del cual las diferencias estadísticas entre ventanas sí son significativas, dicho instante se tratará del inicio del proceso estacionario.

Este análisis de la media y la varianza entre distintas poblaciones o conjuntos de datos es comúnmente conocido como ANOVA. En él, se establece la hipótesis nula de que las medias de las distintas ventanas temporales son distintas. Si dicha hipótesis puede ser rechazada con un nivel de significancia mayor al 5%, existirá evidencia estadística suficiente para afirmar que las distintas poblaciones poseen la misma media. Este será el requisito para determinar si cada una de las señales registradas en cada punto ha alcanzado, o no, el estado estacionario.

Así pues, recopilando la información recogida en los distintos puntos, podrá determinarse el instante a partir del cual se alcanza el estado estacionario en toda la región de interés del dominio. Se presenta a continuación en las Figuras 17, 18 y 19 la evolución de $[H_2]$, U y ΔP respectivamente en los 4 puntos ya definidos en la Tabla 7.

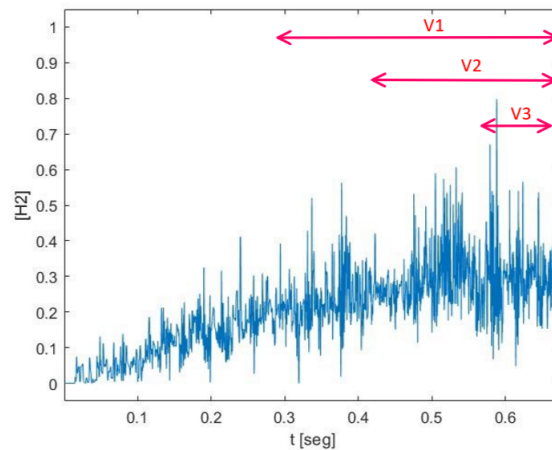


Figura 16: Evolución temporal de la concentración de hidrógeno $[H_2]$ en el Punto 4.

3.3.2. Análisis en frecuencia

La complejidad del proceso de inyección imposibilita predecir con exactitud características tan importantes de cara a su implementación como es la estabilidad de la llama. Mediante el análisis de las frecuencias dominantes en el caso de estudio, es posible comparar con datos experimentales de casos similares y así conseguir tanto validar la simulación como determinar unas condiciones de operación óptimas.

El número de Swirl se trata de un parámetro adimensional característico de este tipo de procesos de inyección, y resulta útil para comparar con casos similares. La definición simplificada del número de Swirl S viene dada en la Ecuación 10, donde U_z es la velocidad axial y U_θ la velocidad tangencial. Según numerosos estudios experimentales [5] [12], los valores de S por encima del valor crítico de 0,5 – 0,6 aseguran la formación de la IRZ y el PVC, que son estructuras turbulentas fundamentales para el proceso de mezcla, descritas en el Apartado 2.4. Por ello, se debe comprobar la similitud respecto al número de Swirl entre el caso estudiado y la bibliografía para poder comparar los resultados.

$$S = \frac{U_\theta}{U_z} \quad (10)$$

Por otro lado, la zona del PVC (*Precessing Vortex Core*), tal y como se desarrolla en el Apartado 2.4, corresponde a la zona de mayor intensidad turbulenta, y es donde se encuentran realmente los problemas en cuanto a estabilidad de la mezcla y soplado de llama. No es posible predecir el comportamiento del PVC a partir de las condiciones de contorno del problema. El método para asegurar unas condiciones de operación adecuadas consiste en realizar un estudio

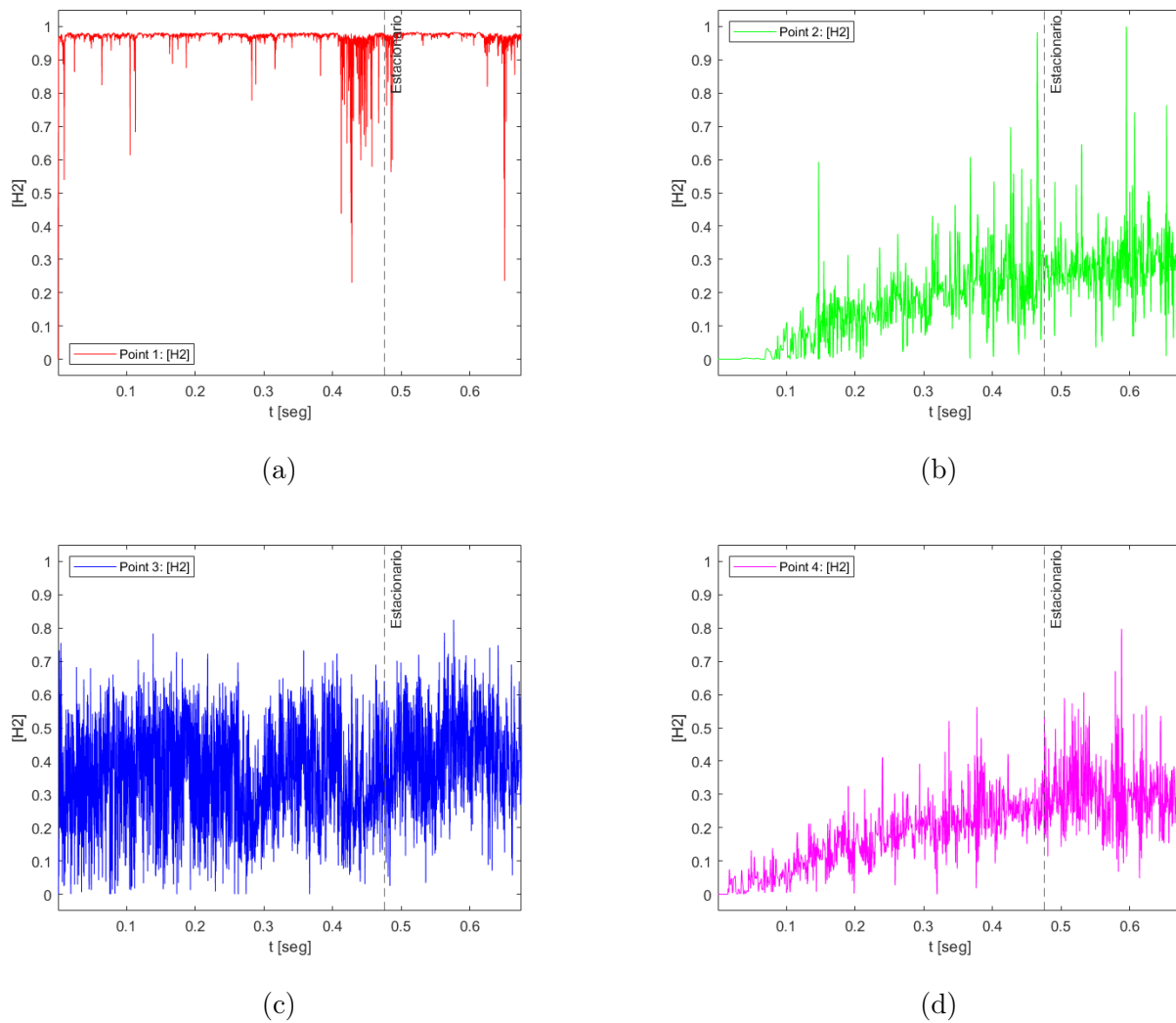
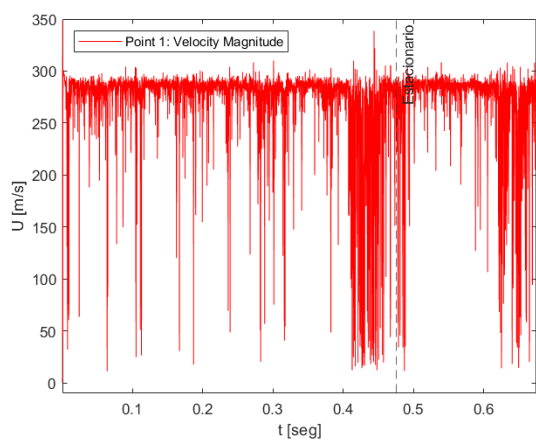


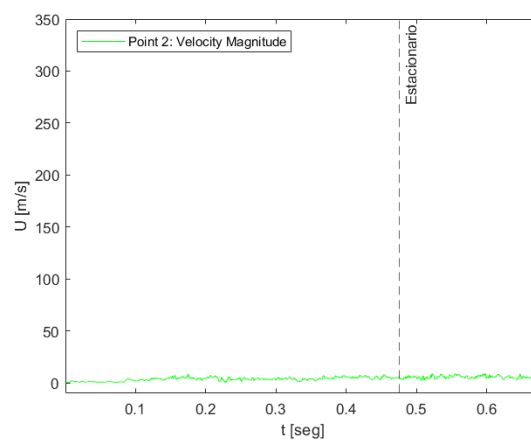
Figura 17: Evolución temporal de la concentración de hidrógeno $[H_2]$ en los distintos puntos de monitorizado.

de las frecuencias dominantes del proceso, y obtener similitud con las encontradas en un caso experimental real.

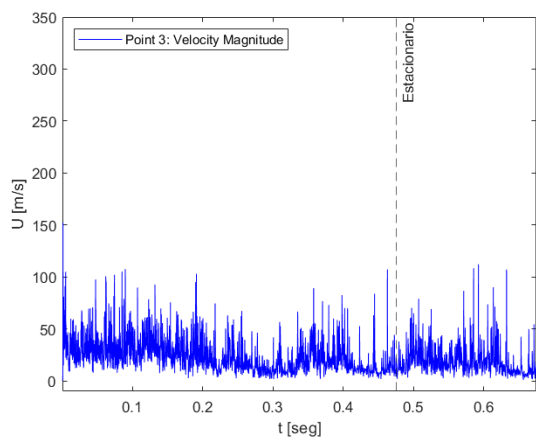
Así pues, para obtener las frecuencias dominantes en el proceso de inyección, es posible realizar un análisis en frecuencia de las señales registradas en el Apartado 3.3.1. Con el fin de comparar con otros estudios, se extraerá el contenido en frecuencia de la señal correspondiente a la velocidad en los distintos puntos cercanos a la inyección mediante el método de Transformada Rápida de Fourier (FFT). Tal y como se detalla en el Apartado 4, el PVC se sitúa en este caso alrededor del Punto 1 de análisis, por lo que la señal analizada corresponde a la mostrada en la Figura 18 (a). La Figura 20 muestra la comparativa entre las frecuencias dominantes encontradas en este caso y en la bibliografía [5] [19]. Tal y como se observa, existe una clara similitud entre los resultados de los distintos trabajos, lo cual otorga validez al estudio realizado.



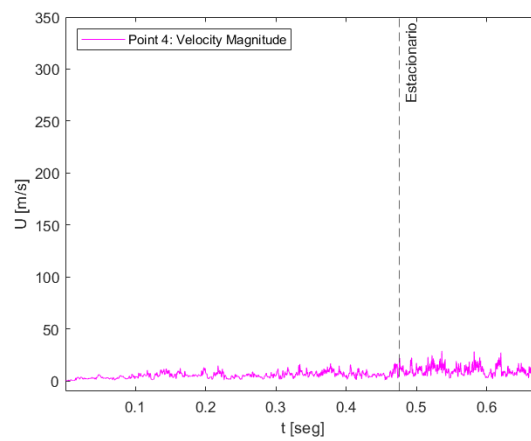
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 18: Evolución temporal del módulo de la velocidad U en los distintos puntos de monitorizado.

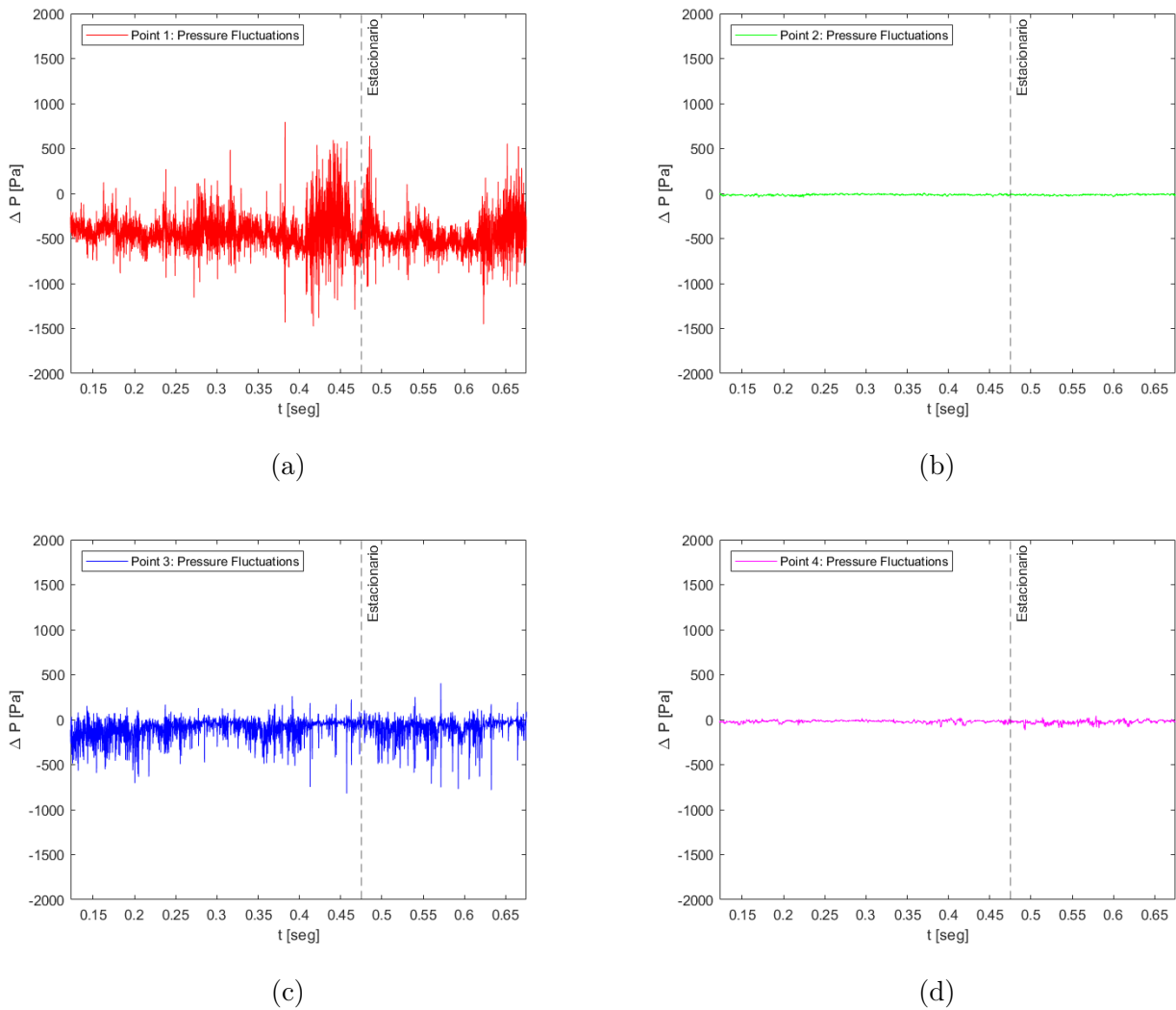
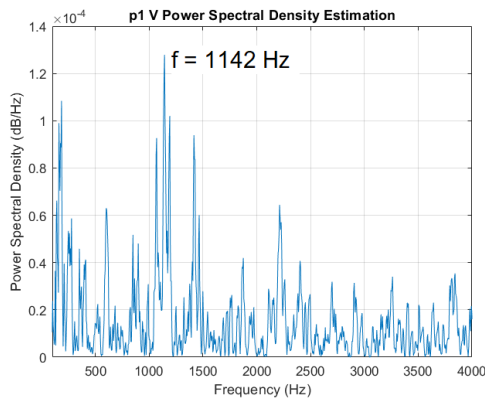


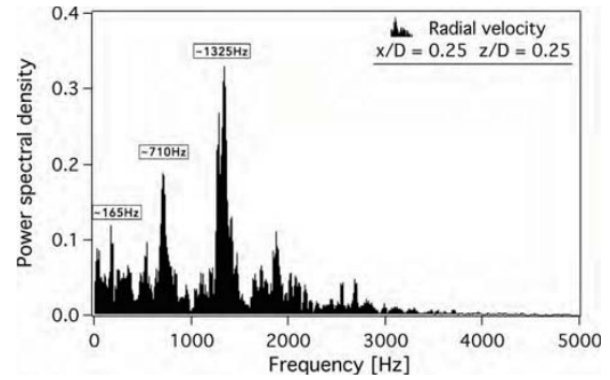
Figura 19: Evolución temporal de las fluctuaciones de presión ΔP en los distintos puntos de monitorizado.

3.3.3. Validación: Índices de calidad en LES

Tal y como se ha desarrollado en el Apartado 3.1.3, el tamaño de cada elemento de la malla computacional es un factor determinante en la resolución de las estructuras turbulentas en simulaciones LES. Una vez concluido el cálculo, es posible evaluar la magnitud de la componente resuelta de las variables turbulentas respecto a la componente modelada dentro de la *sub-grid scale* (SGS). Así pues, se definen distintos parámetros para evaluar la calidad de los resultados del LES o, en otras palabras, el nivel de resolución de las escalas turbulentas. La definición de los criterios de calidad y filtrado en LES quedan recogidos en las referencias [20] y [21].



(a)



(b)

Figura 20: Comparativa entre el estudio de frecuencias dominantes realizado en este trabajo (a) y el realizado en la bibliografía [5] (b).

Índice basados en la resolución de la turbulencia Tal y como se establece en [20], una buena calidad de solución en LES exige que el 80 % de la energía cinética turbulenta sea resuelta. Este índice se define entonces como un ratio entre la energía cinética turbulenta resuelta y la total, tal y como aparece en la Ecuación 11, donde k_{res} es la energía cinética turbulenta resuelta y k_{sgs} es la modelada. Algunos autores añaden a esta definición una componente asociada al error numérico del cálculo k_{num} , la cual se asume igual de relevante que k_{sgs} . Esta variable LES_IQ_k debe ser resuelta en todos los puntos del dominio, de forma que resulte mayor que 0.8 en la región de interés estudiada, como se muestra en la Figura 21.

Además, para una observación más precisa de los valores de LES_IQ_k obtenidos, se ilustra en la Figura 22 la evolución de esta variable en el eje axial del quemador.

$$LES_IQ_k = \frac{k_{res}}{k_{tot}} = \frac{k_{res}}{k_{res} + k_{sgs}} \quad (11)$$

Índices basados en la viscosidad turbulenta En este caso, se evalúa la contribución de la viscosidad modelada ν_{sgs} con respecto a la viscosidad laminar del fluido ν . La variable definida en la Ecuación 12, donde el valor de los coeficientes $\alpha_v = 0,05$ y $n = 0,53$ se determina a través de simulaciones DNS. En la Figura 23 se representa el valor de esta variable en el dominio computacional.

$$LES_IQ_v = \frac{1}{1 + \alpha_v \left(\frac{\nu_{sgs} + \nu + \nu_{num}}{\nu} \right)^n} \quad (12)$$

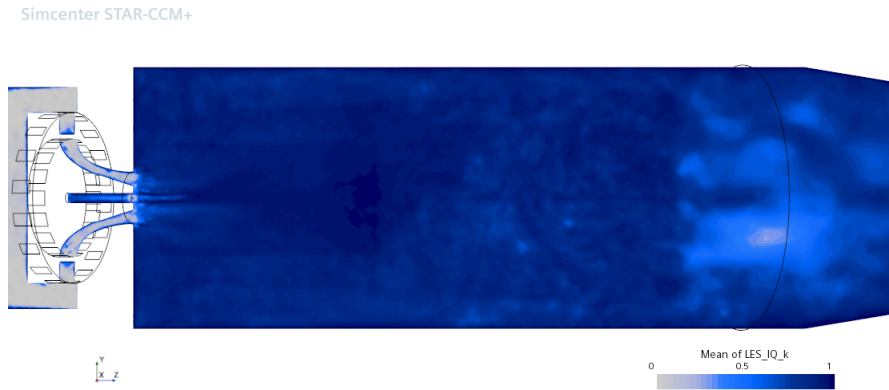


Figura 21: Promediado temporal del índice LES_IQ_k en el plano $[x = 0]$.

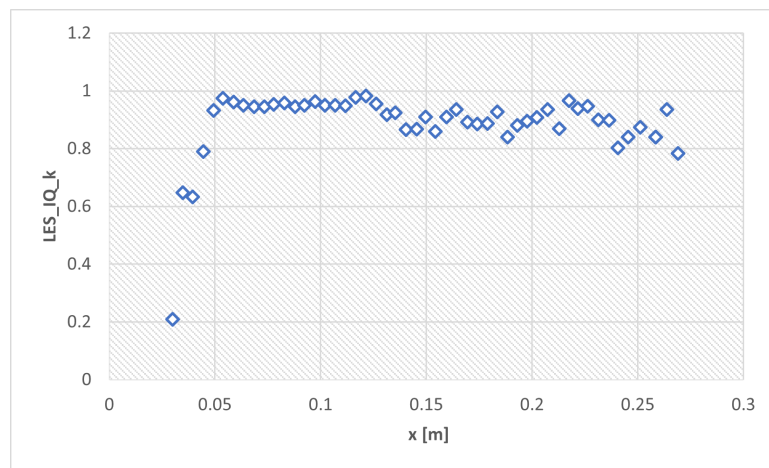


Figura 22: Evolución del índice LES_IQ_k a lo largo del eje $[x = 0, y = 0]$.

Índices basados en la resolución de la malla Este índice LES_IQ_η compara el tamaño del elemento resuelto con una estimación de la escala de Kolmogorov (el tamaño de las escalas turbulentas más pequeñas). Se define en la Ecuación 13, donde $\alpha_v = 0,05$ y $m = 0,5$. La escala de Kolmogorov η se estima mediante la Ecuación 14, donde l_t es la escala integral, estimada como $0,02mm$.

$$LES_IQ_\eta = \frac{1}{1 + \alpha_v \left(\frac{\Delta}{\eta}\right)^m} \quad (13)$$

$$\eta = \left(\frac{v^3}{w^3}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (14)$$



Figura 23: Promediado temporal del índice LES_IQ_v en el plano $[x = 0]$.

Tras observar las Figuras 21 y 23 es posible extraer distintas conclusiones. La Figura 21 revela una calidad computacional insuficiente en la zona más próxima a la inyección. Esta región, aunque sea pequeña, resulta de gran interés para el estudio del proceso de mezcla, por lo que convendría obtener un valor de LES_IQ_k suficientemente alto en toda la región de interés.

Para ello, es necesario reducir aún más el tamaño de las celdas en dicha región. Sin embargo, el coste computacional que añade esta operación imposibilita realizar el cálculo en un periodo de tiempo razonable.

4. Resultados

Una vez validada la calidad de la simulación (Apartado 3.3.3) y garantizada la estacionariedad del proceso (Apartado 3.3.1), los resultados del cálculo serán representativos de la operación continua del quemador y sus prestaciones. En este apartado se recogen los resultados del postproceso realizado, así como la información a extraer de dichos resultados. Cabe mencionar que la información extraída de un único instante no es representativa para el proceso, por lo que todas las magnitudes mostradas en este apartado corresponden al promediado temporal de las mismas durante 0.2 segundos.

4.1. Caso base

Las condiciones de contorno ya han sido introducidas en la Tabla 2. El valor impuesto de flujo másico de hidrógeno \dot{m}_{H_2} corresponde con el encontrado en el trabajo de M. Barre [5] para así poder comparar dos casos similares en cuanto a configuración. Sin embargo, la baja densidad del hidrógeno ($\rho_{H_2} = 0,09kg/m^3$) con respecto a la del metano ($\rho_{CH_4} = 0,66kg/m^3$) supone que, para un mismo flujo másico y diámetro de salida d , la velocidad de entrada de hidrógeno en la cámara será mucho mayor.

4.1.1. Campo de velocidades

Al resolver el campo fluido en todo el dominio computacional, es útil analizar la distribución de la velocidad y sus distintas componentes en aquellas zonas de interés para poder comparar con datos experimentales. Dado que La Figura 24 representa el promediado de la velocidad en sus distintas componentes U_z , U_θ y U_r . Por otro lado, la Figura 25 muestra el promedio del RMS (*Root Mean Square*) de las fluctuaciones de velocidad u'_a , u'_θ y u'_r . La amplitud de estas fluctuaciones se relacionan directamente con la intensidad de la turbulencia, por lo que revelan una pequeña zona de turbulencia intensa que corresponde al PVC.

Para analizar en mayor detalle el campo de velocidades en la zona cercana a la inyección, tal y como se muestra en las Figuras 26, 27 y 28, se han promediado las tres componentes de la velocidad a lo largo de distintas líneas contenidas en el plano $[x = 0]$ y con distinta posición en el eje Z. Dichas posiciones corresponden a: $z/D = (0,25, 0,5, 1, 1,5, 2)$. Además, las Figuras 29, 30 y 31 muestran de la misma forma el valor promedio de las fluctuaciones de velocidad en los mismos puntos del dominio.

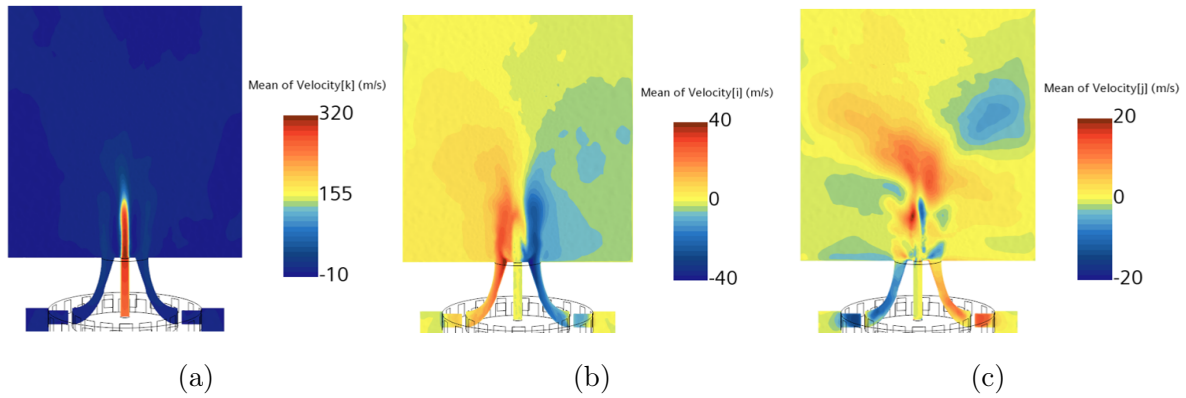


Figura 24: Promediado de las componentes de la velocidad: a) axial U_z , b) tangencial U_θ y c) radial U_r .

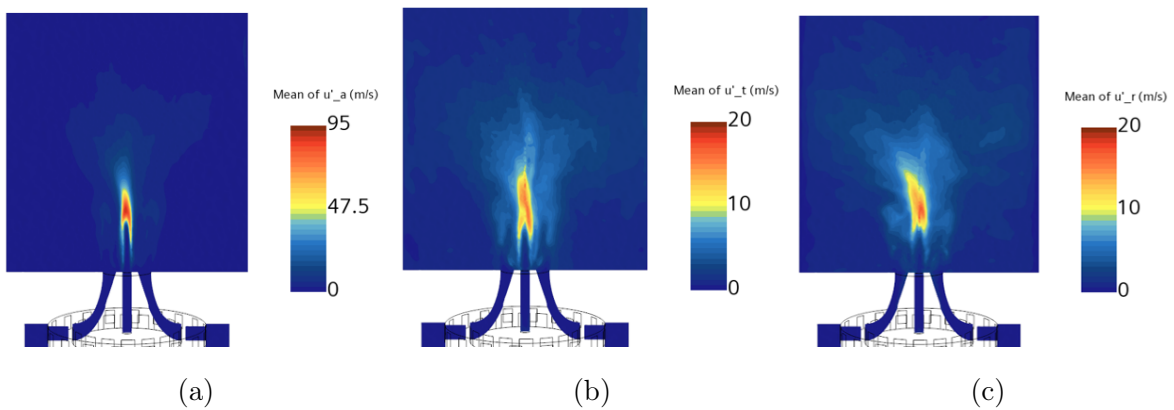


Figura 25: Promediado del RMS de las fluctuaciones de velocidad en las tres componentes: a) axial u'_a , b) tangencial u'_t y c) radial u'_r .

Tal y como se observa en la Figura 26, la velocidad axial de entrada en cámara del hidrógeno resulta del orden de 300 m/s. Dicha velocidad axial resulta excesiva comparada con otros casos revisados, y aunque esta aminora conforme se avanza en el eje Z, no llega a tomar valores negativos en la zona central. Esto supone la inexistencia de la IRZ, una zona de recirculación clave para la correcta mezcla de los gases. Este resultado indica que es necesario una mayor equivalencia entre las velocidades de entrada en cámara del N_2 y el H_2 para conseguir una correcta recirculación.

Por otro lado, las Figuras 29, 30 y 31 indican una zona de elevada turbulencia correspondiente al PVC situada entre $z = D$ y $z = 1,5D$, desplazada aguas abajo respecto a su localización habitual ($z = 0,5D$) [5].

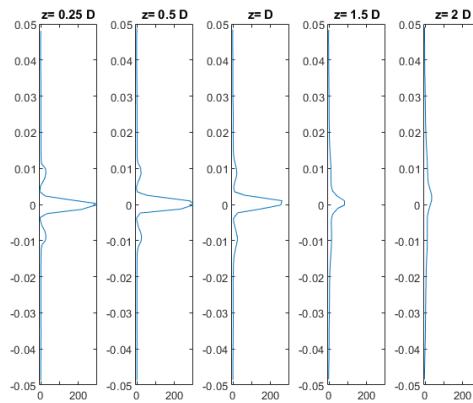


Figura 26: Promediado de la velocidad axial U_z en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z .

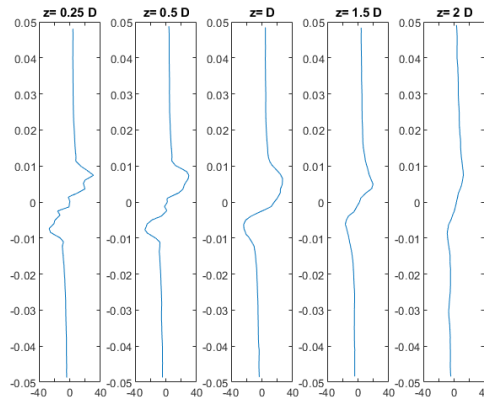


Figura 27: Promediado de la velocidad tangencial U_θ en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z .

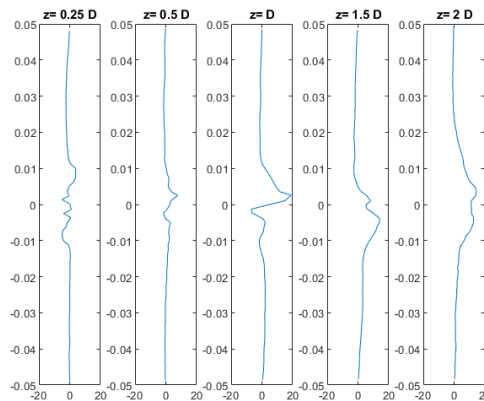


Figura 28: Promediado de la velocidad radial U_r en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z .

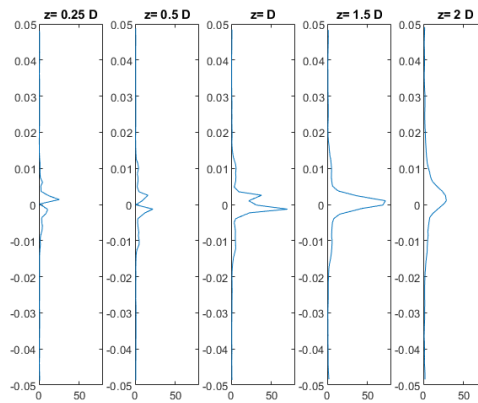


Figura 29: Promediado del RMS de la velocidad axial u'_a en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z .

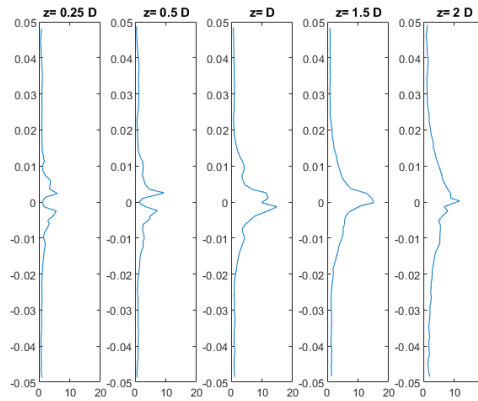


Figura 30: Promediado del RMS de la velocidad tangencial u'_θ en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z .

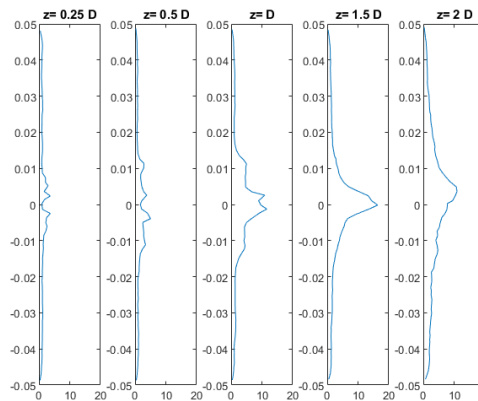


Figura 31: Promediado del RMS de la velocidad radial u'_r en el plano $[x = 0]$ para distintas posiciones en el eje Z .

4.1.2. Mezcla

El postproceso permite visualizar el proceso de mezcla, tal y como muestra la Figura 32. Puede observarse que, a partir del instante en que se alcanza el estado estacionario, la estructura de la mezcla resulta prácticamente invariable a gran escala. Por ello, es posible extraer información acerca de la inflamabilidad y eficiencia de la mezcla a partir de este instante.

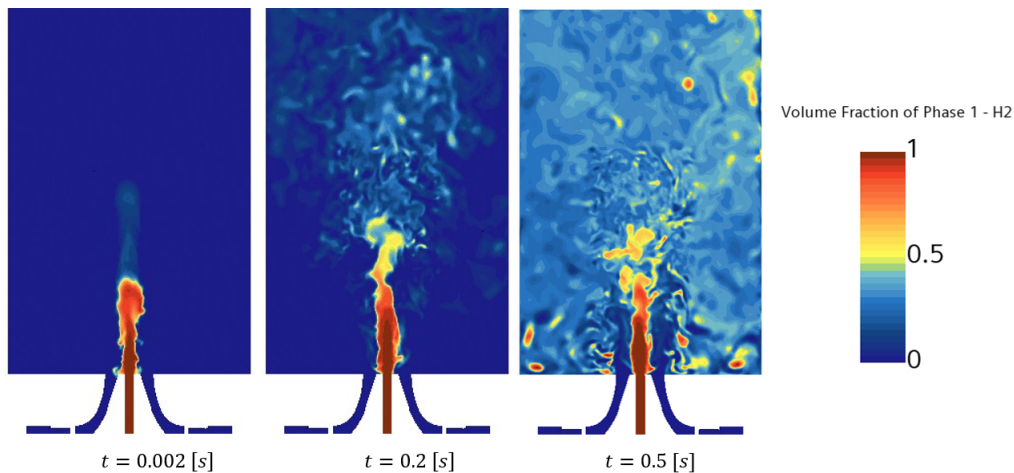


Figura 32: Evolución temporal de la concentración de hidrógeno $[H_2]$ en el dominio computacional.

Los límites de inflamabilidad son aquellos valores de concentración de hidrógeno en la mezcla que delimitan la posibilidad de ignición y combustión. El límite de inflamabilidad inferior del hidrógeno corresponde a $[H_2] = 0,04$, mientras que el superior resulta $[H_2] = 0,74$. Cualquier punto cuya concentración se encuentre por debajo del límite inferior o por encima del superior no podrá ser encendido. La Figura 33 representa las iso-superficies de $[H_2]$ correspondientes a los límites de inflamabilidad. La región encerrada entre dichas superficies alberga la posibilidad de sufrir el proceso de encendido de la mezcla en caso de un aporte de calor. Por ello, en caso de realizar una combustión real, la llama de difusión debería situarse aproximadamente en el interior de esta región.

Tal y como se observa en la Figura 33, la posible zona de formación de llama queda alejada de las paredes, y aunque se observen numerosas burbujas en la zona de recirculación, este puede ser un punto seguro y controlado de operación. Sin embargo, se observa un valor para la velocidad del flujo muy elevado en la zona central de la llama, lo cual puede suponer el soplado y extinción de esta.

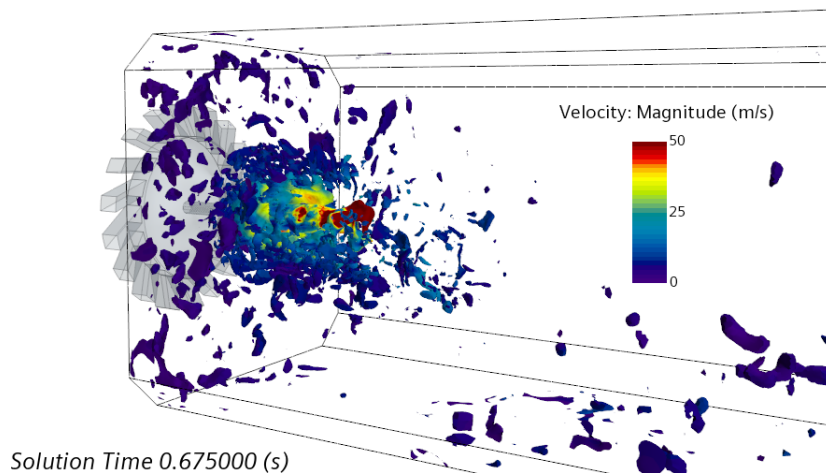


Figura 33: Contorno de velocidad sobre iso-superficies de concentración de hidrógeno correspondientes a los límites de inflamabilidad de la mezcla ($[H_2] = 0,04$ y $[H_2] = 0,75$).

4.1.3. Estructura del flujo

Aunque el campo de velocidades obtenido en el apartado 4.1.1 revele información acerca de la estructura del flujo, es posible hacer uso de las herramientas de CFD para entender de mejor forma el comportamiento del flujo [22] [23].

- **PVC:** Existe un método habitual para la visualización del *Precessing Vortex Core*, ilustrado en la Figura 34. Tal y como se observa, las iso-superficies de presión se dividen en distintas ramas que son orientadas de forma helicoidal debido al movimiento rotatorio del flujo de N_2 entrante. En su interior, se encuentra una iso-superficie de velocidad axial negativa que revela una zona de recirculación muy cercana a la inyección correspondiente al PVC.
- **CRZ:** Esta zona de recirculación se sitúa en las esquinas del quemador y resulta de gran importancia para el anclado de la llama en una posición fija. El método para su visualización consiste en proyectar las líneas de corriente del flujo en el plano $[x = 0]$, tal y como muestra la Figura 35. La CRZ corresponde a los patrones de recirculación circulares observados en las esquinas de la cámara de combustión. Aunque su presencia indica que los resultados reproducen fielmente el proceso de mezcla, su tamaño resulta muy reducido comparando con otras simulaciones similares [5].

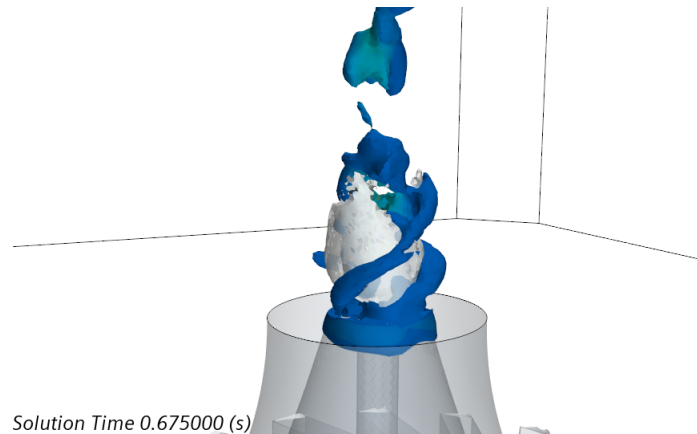


Figura 34: Visualización del PVC (*Precessing Vortex Core*).
Iso-superficie de presión (azul) e iso-superficie de velocidad axial
 $U_z = -4 \text{ m/s}$ (blanco).

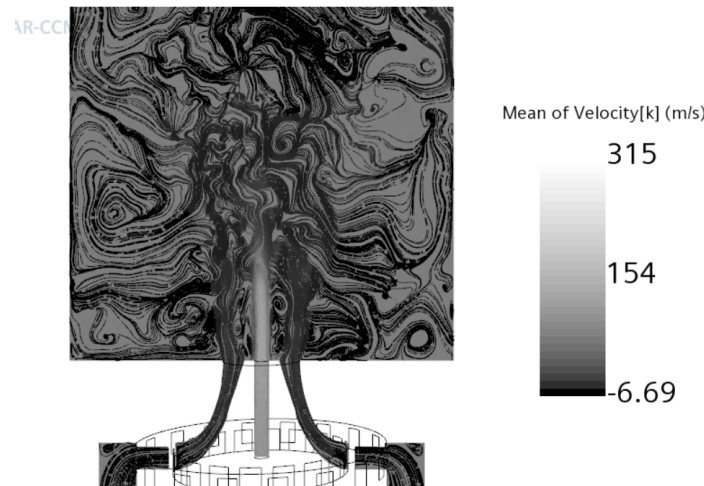


Figura 35: Visualización de la CRZ (*Corner Recirculation Zone*). Líneas de corriente del flujo mostrando el promedio de la velocidad axial.

- **IRZ:** Como ya se ha comentado en el Apartado 4.1.1, la Figura 26 indica la inexistencia de la *Inner Recirculation Zone*. La Figura 19 (a) confirma una disminución de la presión en la zona central de la mezcla, lo cual induce el movimiento del gas aguas arriba, hacia el interior de la mezcla, lo cual es un requisito fundamental para la formación de la IRZ. Sin embargo, esta recirculación existente no resulta suficiente para disminuir la velocidad del H_2 entrante hasta valores negativos. Tal y como muestran las Figuras 29 y 27, en el punto en el que la velocidad axial disminuye lo suficiente $z = 2D$, la componente tangencial de la velocidad es casi nula y, por tanto, tal y como indica la Figura 19 (c), la caída de presión es mucho menor, anulando la recirculación del flujo.

5. Conclusiones y desarrollos futuros

5.1. Conclusiones

Esta sección tratará de sintetizar todas las ideas y conceptos introducidos y desarrollados en el presente trabajo. La lectura general del trabajo se puede resumir en que los resultados de la simulación, aunque otorguen una buena estimación del proceso real, no resultan concluyentes de cara a la implementación de un quemador operando en condiciones óptimas. Se especifican a continuación las conclusiones a extraer de este trabajo:

- La malla computacional establecida no permite validar completamente los resultados. Los índices de calidad obtenidos en el Apartado 3.3.3 indican un tamaño de celdas insuficiente para la correcta resolución de las escalas turbulentas. Sin embargo, el coste computacional requerido para solventar este problema supera los recursos y tiempo disponibles para la realización de este proyecto.
- Los índices de calidad también revelan un buen modelado de las propiedades del fluido a la hora de resolver las escalas turbulentas más pequeñas, por lo que se reafirma el buen funcionamiento del modelo SGS empleado.
- Para este caso de estudio en particular, el proceso de inyección sólo es analizable a partir de instante $t = 0,5s$ desde el inicio, dada la transitoriedad inicial del flujo.
- Los resultados obtenidos en el estudio de frecuencias del Apartado 3.3.2 indican que las inestabilidades en el interior del PVC resultan muy similares a las encontradas en otros estudios. Por ello, se espera un comportamiento nominal en lo que a esta zona del flujo respecta.
- El campo de velocidades analizado revela la inexistencia de la IRZ en la región cercana a la inyección. Esto supone una mezcla ineficiente del combustible y el aire y por tanto, el caso estudiado en este trabajo no es un punto de operación óptimo de cara a la implementación del quemador en un laboratorio.

5.2. Desarrollos futuros

Dadas las conclusiones extraídas del proyecto, se plantean aquellas vías de desarrollo y trabajos futuros que deberían realizarse para complementar el trabajo y alcanzar unos resultados concluyentes.

- Es evidente que para obtener unos resultados completamente validados es necesario un aumento del número de celdas, para lo cual es necesario disponer de mayores recursos computacionales. Dada la magnitud del número de celdas actual, es necesario recurrir a clústers de numerosos procesadores para la realización de estas simulaciones.
- Para validar definitivamente los resultados obtenidos del CFD, debe reproducirse el caso de estudio de forma experimental con el objetivo de encontrar similitud con los resultados de este trabajo. A través de numerosos ensayos, es posible obtener medidas del campo de velocidades del flujo para compararlo con el obtenido en la simulación.
- De cara a la ya mencionada implementación experimental del caso de estudio, resultaría conveniente la realización de otro estudio CFD en busca de unas condiciones de operación más óptimas. Los resultados sugieren variar las condiciones de contorno del problema para reducir la velocidad del flujo de la inyección central.

6. Bibliografía

Referencias

- [1] H. Ritchie, M. Roser, and P. Rosado, “Co2 and greenhouse gas emissions,” Disponible en ourworldindata.org (2023/04/01), 2020.
- [2] Emoscopes, “Schematic diagram of the operation of a axial flow turbojet engine,” 2005, accedido 31 de julio de 2023. [Online]. Available: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Turbojetoperation-axialflow.png>
- [3] Sidewinder, “A diagram of a gas turbine combustor, with the major components labeled,” 2010, accedido 31 de julio de 2023. [Online]. Available: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:CombustordiagramcomponentsPNG.png>
- [4] SidewinderX, “Diagram of air flow paths in a gas turbine combustor,” 2010, accedido 31 de julio de 2023. [Online]. Available: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Combustordiagramairflow.png>
- [5] M. D. Barre, “Simulation numerique de l’allumage dans les chambres de combustion aeronautiques,” Tesis Doctoral, 2014.
- [6] D. Silberhorn and G. Atanasov, “Assessment of hydrogen fuel tank integration at aircraft level.” Hamburgo, Alemania: German Aerospace Center (DLR), Institute of System Architectures in Aeronautics, 2019.
- [7] A. H. Lefebvre and D. R. Ballal, *Gas Turbine Combustion. Alternative Fuels and Emissions*. CRC Press, 2010.
- [8] G. P. López, “Emisiones en turbinas de gas:origen, mecanismos de formación, técnicas de control y reglamentación,” Trabajo Fin de Grado, 2016.
- [9] C. J. Marek, T. D. Smith, and K. Kundu, “Low emission hydrogen combustors for gas turbines using lean direct injection,” in *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Tucson, USA, 2005.
- [10] G. Corchero and J. L. Montañés, “An approach to the use of hydrogen for commercial aircraft engines,” *Journal of Aerospace Engineering*, vol. 219, pp. 34–44, 2005.

- [11] J. Mukhopadhyaya and D. Rutherford, “Performance analysis of evolutionary hydrogen-powered aircraft,” Disponible en <https://theicct.org/publication/aviation-global-evohydrogen-aircraft-jan22/> (2023/02/20), 2022.
- [12] L. Y. M. Gicquel, G. Staffelbach, and T. Poinso, “Large eddy simulations of gaseous flames in gas turbine combustion chambers,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 38, no. 6, pp. 782–817, 2012.
- [13] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinso, U. Meier, , and C. Bérat, “Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations,” *Combustion and Flame*, vol. 141, pp. 40–54, 2005.
- [14] O. Stein and A. Kempf, “Les of the sydney swirl flame series: a study of vortex breakdown in isothermal and reacting flows,” *Proc. Combust. Inst.*, vol. 31, pp. 1755–1763, 2007.
- [15] T. Sarpkaya, “On stationary and travelling vortex breakdowns,” *J. Fluid Mech*, vol. 45, pp. 545–559, 1971.
- [16] A. Valera-Medina, N. Syred, , and A. Griffiths, “Visualisation of isothermal large coherent structures in a swirl burner,” *Combustion and Flame*, vol. 156, pp. 1723–1734, 2009.
- [17] R. R. Villar, “Estudio del campo lejano de chorros de urea-agua y de la formación de películas líquidas y depósitos en la línea de escape,” Trabajo Fin de Grado, 2022.
- [18] L. V. Seisdedos, R. A. T. Codorniu, Y. L. Albuerne, and D. D. Martínez, “Método para detección de estados estacionarios: aplicación a unidades de generación eléctrica,” vol. 35, pp. 45–61, 2014.
- [19] A. Broatch, M. Carreres, J. García-Tíscar, and M. Belmar-Gil, “Spectral analysis and modelling of the spray liquid injection in a lean direct injection (ldi) gas turbine combustor through eulerian-lagrangian large eddy simulations,” *Aerospace Science and Technology*, vol. 118, 2021.
- [20] I. Celik, Z. Cehreli, and I. Yavuz, “Index of resolution quality for large eddy simulations,” *Journal of Fluids Engineering-transactions of The Asme*, vol. 127, 2005.
- [21] I. Celik, M. Klein, and y J. Janicka, “Index of resolution quality for large eddy simulations,” *Journal of Fluids Engineering-transactions of The Asme*, vol. 131, 2009.

- [22] M. Baker, “Q-criterion for vortex visualization, m4 engineering,” 2021, accedido 4 de abril de 2023. [Online]. Available: <https://www.m4-engineering.com/q-criterion-for-vortex-visualization/>
- [23] J. Zhan, Z. Chen, C. Li, W.-Q. Hu, and Y. Li, “Vortex identification and evolution of a jet in cross flow based on vortex,” *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. 14, pp. 1237–1250, 2020.

7. Pliego de Condiciones

El pliego de condiciones es el documento contractual cuyo objetivo es presentar las exigencias técnicas y legales que rigen la ejecución del presente Trabajo Final de Grado, así como especificar el correcto uso de las instalaciones y equipos.

Este documento se divide en dos partes: pliego de condiciones generales y pliego de condiciones particulares. El primero incluye las responsabilidades del personal implicado en el trabajo, y las condiciones del trabajo durante el estudio computacional. El segundo incluye las condiciones particulares de este trabajo, consideraciones de las que el trabajador debe ser informado, materiales y equipos informáticos. Con todo ello, se deberá atender a las condiciones técnicas en las siguientes secciones a fin de garantizar la correcta ejecución de las tareas, así como la interpretación de resultados.

7.1. Condiciones y normas generales

En el presente capítulo se describirán las condiciones generales que rigen las obligaciones y derechos de los trabajadores involucrados, así como las condiciones del puesto de trabajo referidas al análisis y estudio computacional.

7.1.1. Obligaciones y derechos de los trabajadores

De acuerdo con las Disposiciones Generales de la Ordenanza General de Seguridad e Higiene en el Trabajo publicadas en el Boletín Oficial del Estado (referencia BOEA-1971-380), los trabajadores están obligados a cooperar en la prevención de riesgos profesionales en la empresa y el mantenimiento de la máxima higiene en la misma, cumplir fielmente los preceptos de la mencionada Ordenanza y sus instrucciones complementarias, así como obedecer las instrucciones que les hayan sido facilitadas por sus superiores a tales efectos.

Así, los trabajadores están obligados a:

1. Recibir las enseñanzas sobre materia en Seguridad e Higiene y sobre el salvamento y socorrismo en los centros de trabajo (facilitados por la empresa o acogiéndose al Plan Nacional).
2. Utilizar debidamente los medios de protección personal y asegurar su correcto estado de conservación.

3. Informar y advertir de posibles averías, deficiencias u otros escenarios de peligro potencial en el puesto de trabajo a sus superiores.
4. Mantener una higiene personal apropiada para evitar posibles enfermedades y molestias a los trabajadores compañeros.
5. Someterse a los reconocimientos médicos, vacunaciones y/o inmunizaciones ordenadas por las Autoridades Sanitarias o el Servicio Médico de las Empresas.
6. No introducir bebidas u otras sustancias no autorizadas a los centros de trabajo, ni acudir a los mismos en estado de embriaguez u otro tipo de intoxicación.
7. Cooperar en la extinción de siniestros y salvamento de víctimas de accidentes de trabajo.
8. Solicitar de inmediato a su superior los medios de protección personal de carácter preventivo para la realización de su trabajo. En caso de que no le sean facilitados, se debería advertir al Comité de Seguridad e Higiene o a la Inspección Provincial del Trabajo.

7.1.2. Condiciones del puesto de trabajo

De acuerdo con los objetivos del proyecto, la mayor parte del tiempo invertido en su realización se basa en el tratamiento computacional de datos, así como el conjunto de simulaciones CFD previstas. Por ello, resulta de interés atender a las disposiciones del Real Decreto 488/1997 de 14 de Abril, que establece los preceptos mínimos de seguridad y salud por parte de los trabajadores en la utilización de equipos que incluyan pantallas de visualización de datos (PVD). En este se aplican las disposiciones de Ley 31/1995 de 8 de Noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales.

Ergonomía. Calidad del puesto de trabajo El trabajo con pantallas de visualización implica posturas estáticas prolongadas, por lo que se debe diseñar apropiadamente el puesto de trabajo con el fin de evitar los problemas posturales. Así, los estándares de fabricación establecidos para tratar de diseñar un puesto de trabajo de calidad son:

- **Asiento:** Debe incorporar un sistema para ajustar adecuadamente la altura e inclinación. El respaldo debe tener una leve prominencia en la zona lumbar. Asimismo, la superficie del mismo deberá ser transpirable y se recomienda el uso de sillas rotatorias.

- Mesa y espacio de trabajo: Las dimensiones deben ser suficientes para colocar una pantalla, los periféricos requeridos, así como los documentos y libros de consulta a utilizar. El aspecto de la mesa y mobiliario general será mate, evitando reflejos, sin esquinas puntiagudas y con superficies lisas y no conductoras del calor.
- Postura: Las piernas deben formar un ángulo recto, y los brazos y antebrazos deben quedar a la altura del espacio de trabajo. La columna vertebral debe permanecer recta, apoyándose sobre el respaldo del asiento.
- Pantalla: La distancia mínima recomendada desde la pantalla a los ojos del trabajador deberá ser superior a 40 cm e inferior a 75 cm, y quedará dentro de un ángulo de 120° del campo de visión del usuario. Deberá posibilitar su colocación y ajuste para adaptarla a las condiciones del entorno.
- Teclado: Será independiente del resto del equipo, posibilitando así su colocación convenientemente. La posición del mismo no debe superar los 25° con respecto a la horizontal y la altura de la tercera fila del teclado no debe superar los 30 mm con respecto a la base. Deberá incorporar superficie mate y evitar disponer de esquinas puntiagudas.

Medidas de emergencia y protección En primer lugar, la sala de trabajo debe localizarse cerca de una salida de emergencia, de modo que el personal pueda desalojar rápidamente su puesto de trabajo en caso de incidencia. Se considera que estas medidas se garantizaron durante la construcción del edificio.

Adicionalmente, se dispondrá de todas las medidas de protección e instalaciones antiincendios acogidas a la normativa vigente, así como medios de iluminación de emergencia adecuados al espacio y al número de trabajadores en la sala, siendo el suministro de estos independiente al del sistema general.

Condiciones Termohigrométricas De acuerdo con el Real Decreto 486/1997, se establecen unas recomendaciones sobre condiciones termohigrométricas, i.e. de temperatura, corriente y humedad.

La temperatura debe mantenerse en el rango entre 20°C y 23 °C. durante el período estival, y entre 23°C y 26 °C en invierno. Así, se deberá disponer de sistemas de ventilación, refrigeración, y calefacción adecuados.

Respecto al grado de humedad relativa, esta deberá mantenerse, independientemente de la temperatura, entre el 45 % y 65 % para prevenir problemas de sequedad.

Iluminación La iluminación del área de trabajo puede ser artificial o natural, siendo esta última más recomendable. En caso de de iluminación con luz natural, debido a las variaciones de intensidad a lo largo del día, se deberá complementar con iluminación artificial.

En conjunto, se deberá garantizar unos niveles de iluminación adecuados a las luminancias de la pantalla y su entorno, así como las necesidades visuales del usuario. Se deben evitar deslumbramientos y contrastes excesivos. Por ello, las pantallas deben ubicarse en dirección perpendicular a las ventanas y nunca de frente a ellas. Sin embargo, se recomienda la incorporación de cortinas o persianas que eviten los reflejos o deslumbramientos derivados de la disposición las ventanas y pantallas en determinadas franjas horarias.

Instalaciones eléctricas La instalación eléctrica deberá estar proyectada, puesta en funcionamiento y mantenida por una empresa debidamente autorizada por el Ministerio de Industria y Energía o la Consejería de la Comunidad Autónoma con competencias en esta materia. La instalación deberá cumplir con lo aprobado en el Reglamento Electrotécnico para Baja Tensión (REBT) con el objetivo de evitar cualquier incidencia o daño colateral.

Respecto a la seguridad eléctrica, cabe señalar que los puestos de trabajo con PVD deben cumplir las limitaciones de emisiones electromagnéticas establecidas, que exigen su reducción a niveles mínimos para la protección de los trabajadores. Asimismo, se deberá garantizar el correcto mantenimiento de cables y conexiones, separando de manera clara los cables eléctricos de los telefónicos. En relación con esta idea, se obliga a facilitar el acceso y mantenimiento de los cables sin interrupción de las actividades.

Ruido Se deberá asegurar niveles de ruido inferior a los límites establecidos por la norma, evaluando la exposición de los trabajadores al mismo. En caso no poder cumplir los requerimientos, se deberá aplicar las medidas de protección necesarias en el emisor, medio y receptor a fin de minimizarlo, así como garantizar reconocimientos médicos periódicos para los trabajadores expuestos según lo indicado en el Real Decreto 1316/1989 del 27 de Octubre.

En conjunto, para áreas de trabajo con PVD no supone excesivo problema. No obstante, se debe garantizar que el ruido continuado sea el mínimo. Para ello, se deberán utilizar equipos con una mínima emisión sonora y optimización acústica del área de trabajo.

7.2. Condiciones particulares

7.2.1. Especificaciones técnicas

Este proyecto se basa principalmente en la utilización de un software de simulación CFD: *StarCCM+*, así como distintas herramientas de programación como *MATLAB* para el procesado de datos. En este capítulo se van a describir las características de los equipos utilizados.

Equipos informáticos El equipo informático empleado para llevar a cabo el proyecto deberá ser lo suficientemente sofisticado para soportar los procesos de cálculo involucrados, que requieren de un esfuerzo 9 Capítulo 3. Condiciones particulares computacional importante y largos tiempos de simulación. Asimismo, debido al estudio de las diferentes estrategias de mallado y las simulaciones LES llevadas a cabo, las horas de cálculo y los procesadores requeridos son aspectos a considerar. Para ello se ha utilizado el clúster de cálculo Rigel de la UPV, así como un PC particular de las siguientes características:

- Sistema operativo: Windows 11
- Procesador: Intel CoreTMi7 8565U CPU 2GHz
- Velocidad de reloj: 2.16 GHz
- Memoria RAM: 8 GB
- Disco duro: 240 GB

Software Las licencias para el software de cálculo utilizado *StarCCM+* han sido otorgadas por el Instituto Universitario CMT perteneciente a la Universidad Politécnica de Valencia. Mientras que la licencia de *MATLAB*, una herramienta usada para el post-procesado de datos viene otorgada por la Universidad Politécnica de Valencia. Respecto a las licencias de *AutoCAD* para el post-procesado de imágenes y el paquete de ofimática *Microsoft Office*, la Universidad Politécnica de Valencia costea las licencias. Finalmente, cabe comentar la utilización de software secundario de edición de imágenes como *GIMP*, o lectores PDF para la revisión bibliográfica. Todos ellos no implican costes de licencia asociados.

8. Presupuesto

8.1. Planteamiento del presupuesto

En el presente documento se presentan y desglosan los costes asociados a la realización del presente Trabajo Final de Grado. Dentro del presupuesto total, se incluyen los presupuestos parciales referidos el coste de material, equipos experimentales, software, uso de instalaciones y personal involucrado. La unidad monetaria empleada a lo largo del documento es el euro (€).

8.1.1. Metodología presupuestaria

Este proyecto incluye una parte experimental de caracterización geométrica y una parte computacional, por lo que el cálculo del presupuesto se desglosa en diferentes partidas presupuestarias, cada una asociada a un presupuesto parcial:

- Recursos humanos: Los costes asociados incluirán la participación de un becario, técnico de laboratorio, y un Profesor Contratado Doctor a cargo del trabajo.
- Recursos computacionales: En este caso, debido a que el Instituto Universitario CMT Motores Térmicos disponía con anterioridad de los equipos informáticos necesarios para el desarrollo del presente trabajo, se contabilizarán en este presupuesto parcial únicamente los costes de la amortización de los mismos.

Los precios se han definido en base a las tarifas legales vigentes, realizando estimaciones coherentes cuando se ha requerido. Finalmente, el presupuesto total constituirá la suma los diferentes presupuestos parciales, aplicando un 5% en concepto de costes imprevistos y medios auxiliares, y añadiendo Impuesto sobre el Valor Añadido (IVA).

A continuación se describe el desglose de presupuestos parciales, explicando el sistema empleado para estimar las amortizaciones de los equipos, y se finaliza con el presupuesto total del trabajo.

8.1.2. Costes a tener en cuenta

Se describen a continuación todos los recursos que han sido necesarios para la realización de este proyecto.

- Personal

Descripción	<i>Factor</i>	<i>Unidades</i>
Profesor Titular de Universidad	hr	1
Ingeniero superior	hr	1

- Conjunto de equipos informáticos y hardware.

Descripción	<i>Factor</i>	<i>Unidades</i>
Ordenador por portátil HP Pavilion x360	Ud	1
Estación de cálculo	Ud	1
Disco duro externo Sandisk 1 TB Portable SSD	Ud	1
Teclado y ratón inalámbricos Logitech	Ud	1

- Software informático

Descripción	<i>Factor</i>	<i>Unidades</i>
Licencia StarCCM+	hr	2
Licencia MATLAB R2021b	hr	1
Licencia Microsoft Office	hr	1
Licencia MobaXterm	hr	1
Licencia Siemens NX	hr	1
Licencia Overleaf	hr	1

- Instalaciones

Descripción	<i>Factor</i>	<i>Unidades</i>
Oficina	Ud	1
Permisos de oficina	Ud	1
Seguro de oficina	Ud	1

- Material de oficina

Descripción	<i>Factor</i>	<i>Unidades</i>
Libreta de apuntes	Ud	1
Lápices y bolígrafos	Ud	1
Folios	Ud	1

8.1.3. Desglose de costes unitarios

El coste de amortización se calcula como:

$$a = \frac{VC - VR}{n} \quad (15)$$

$$t_h = \frac{a}{h} \quad (16)$$

Donde a es la amortización en euros/año, VC es el valor de la compra, VR es el valor residual del recurso, n es el periodo de amortización en años, h las horas trabajadas al año y t_h la tasa horaria en euros/hora.

Por otro lado, las horas trabajadas del personal se calculan como:

$$\frac{\text{horas trabajadas}}{\text{año}} = \left(\frac{\text{semanas}}{\text{año}} - \frac{\text{semanas vacaciones/festivo}}{\text{año}} \right) \cdot \frac{\text{horas trabajadas}}{\text{semana}} \quad (17)$$

Así pues, se describe a continuación el desglose del coste de cada uno de los recursos descritos anteriormente.

- Equipo informático

- Ordenador portátil: asumiendo un valor residual del 20% y un periodo de amortización de 5 años.

$$a = 143,8 \text{ €/año} \quad (18)$$

$$t_h = 0,078 \text{ €/hora} \quad (19)$$

- Estación de cálculo: asumiendo un valor residual del 20 % y un periodo de amortización de 8 años.

$$a = 300 \text{ €/año} \quad (20)$$

$$t_h = 0,163 \text{ €/hora} \quad (21)$$

- Disco duro externo 1 TB: El precio de la unidad es de 62 €.
- Teclado y ratón: Su precio en conjunto es de 10 €.
- Software
 - Licencia StarCCM+: Se trata de un software de pago. El departamento CMT ha realizado la compra de licencias Power on Demand para este trabajo, cuyo precio es de $t_h = 21 \text{ €/hora}$.
 - Licencia MATLAB: La licencia anual para estudiantes otorgada por la UPV se encuentra valorada en $a = 69 \text{ €/año}$
 - Licencia Microsoft Office: La licencia anual otorgada por la UPV se encuentra valorada en $a = 99 \text{ €/año}$.
 - Licencia MobaXterm: La versión de uso doméstico de este software es gratuita.
 - Licencia Overleaf: Se ha hecho uso de la versión gratuita para estudiantes de Overleaf.
- Personal
 - Profesor titular de Universidad: El salario bruto anual es de $a = 32,520,52 \text{ €/año}$, por lo que el coste horario corresponde a $t_h = 18,74 \text{ €/hora}$.
 - Ingeniero superior: El salario bruto anual es de $a = 21,000 \text{ €/año}$, por lo que el coste horario corresponde a $t_h = 11,41 \text{ €/hora}$.
- Instalaciones
 - Oficina: El coste mensual del espacio de trabajo es de 250 € al mes. Asumiendo un periodo de trabajo de 5 meses, el coste total es de 1250 €.

8.1.4. Presupuesto total

Las tablas incluidas a continuación recogen toda la información acerca del presupuesto del proyecto.

Descripción	Cantidad	Precio unitario	Importe
Mano de obra			
Ingeniero superior	300	11.41 €	3423 €
Doctor	75	18.74 €	937 €
			Total: 4360 €
Equipos			
Ordenador portátil	400	0.078 €	31.2 €
Estación de cálculo	800	0.163 €	130.4 €
			Total: 161.6 €
Recursos			
Disco duro externo 1 TB	1	64 €	64 €
Material de oficina	1	15 €	15 €
Licencia StarCCM+	504	21	10584 €
Licencia MATLAB	1	69 €	69 €
Licencia Microsoft Office	1	99	99 €
			Total: 10831 €
Instalaciones			
Alquiler oficina	1	1250	1250
			Total: 1250 €
			Total recursos: 16602.6 €
			+6 % Beneficio Industrial: 996.12 €
			Total ejecución por contrata: 17598.12 €
			+21 % I.V.A.: 3486.55 €
			Total presupuesto C/IVA: 21084.54 €

El presupuesto proyectado asciende a la expresada cantidad de **VEINTIUN MIL OCHENTA Y CUATRO CON CINCUENTA Y CUATRO EUROS**

