

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



**MODELAMIENTO NUMÉRICO DE FLUJO REACTIVO TURBULENTO EN UN
QUEMADOR TIPO *BLUFF-BODY* USANDO EL MODELO DE COMBUSTIÓN EDC**

**Trabajo de investigación para obtener el grado académico de BACHILLER EN
CIENCIAS CON MENCIÓN EN INGENIERÍA MECÁNICA**

AUTOR:

Edward Javier Manrique De la Cruz

ASESOR:

Dr. Cesar Celis

Lima, diciembre del 2020

Resumen

La combustión representa en la actualidad una de las principales fuentes de generación de energía en el mundo. A pesar de las ventajas significativas de los procesos de combustión, estos traen consigo un problema crítico relacionado con la emisión de contaminantes que impactan directamente en la salud y el medio ambiente. Estudios continuos son por lo tanto requeridos para mejorar la eficiencia de los sistemas de combustión existentes y reducir los efectos negativos de los procesos de combustión. El estudio numérico de una llama difusiva turbulenta en un quemador tipo *bluff-body*, usando OpenFOAM como herramienta computacional, es realizado en este trabajo. El modelamiento numérico es realizado utilizando un abordaje basado en la resolución de las ecuaciones *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS). El modelo de combustión usado es el *Eddy Dissipation Concept* (EDC). GRI-MECH 3.0 es utilizado a su vez como el mecanismo describiendo la cinética química del proceso. La turbulencia es tratada con el modelo RANS k-omega y la radiación con el modelo de aproximación P-1. La malla computacional incluye 900 mil elementos, la cual permite describir razonablemente bien el flujo en la estela próxima al *bluff-body*. Los resultados numéricos obtenidos son comparados con datos experimentales disponibles de campos de velocidad, tensores de Reynolds y perfiles de OH. Las referidas comparaciones enfatizan que hay una concordancia aceptable entre los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas y los valores de los parámetros medidos experimentalmente. Esto implica que el modelo de combustión EDC puede ser utilizado para caracterizar el flujo reactivo turbulento en configuraciones de quemadores como los analizados en este trabajo.

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	iii
ÍNDICE DE FIGURAS.....	iv
Introducción	1
Capítulo 1. Formulación matemática.....	6
1.1. Ecuaciones fundamentales de la dinámica de fluidos.....	6
1.2. Modelo de turbulencia	9
1.3. Modelo de combustión.....	10
1.4. Modelo de radiación	11
Capítulo 2. Modelamiento numérico	13
2.1. Solucionador y esquemas numéricos.....	13
2.2. Configuración geométrica.....	13
2.3. Generación de malla computacional.....	15
2.4. Condiciones de contorno.....	16
Capítulo 3. Resultados y discusiones.....	18
3.1. Análisis de independencia de malla.....	18
3.2. Comparación de los campos medios de velocidad	19
3.3. Comparación de la energía cinética turbulenta y los tensores de Reynolds	22
3.4. Comparación de la especie química OH.....	27
Conclusiones.....	30
Bibliografía	32

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Resumen de las condiciones de ingreso del combustible y oxidante.....	16
Tabla 2. Resumen de las condiciones de borde usadas en OpenFOAM para los ductos y la salida del dominio computacional.	17



ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Esquema del quemador tipo <i>bluff-body</i> con dimensiones en mm usado en los experimentos realizados por Nattan Caetano.....	14
Figura 2. Configuración geométrica y dominio computacional con dimensiones en mm.....	14
Figura 3. Malla computacional indicando los <i>patches</i> definidos para las condiciones de borde en OpenFOAM.....	15
Figura 4. Resultados numéricos obtenidos para (a) velocidad U_y y (b) perfil de tensor de Reynolds normal radial (R_{xx}) con diferentes mallas.....	18
Figura 5. Contornos de los resultados (i) experimentales y ii) numéricos para la componente de la velocidad axial U_y (superior) y la componente de la velocidad radial U_x (inferior).....	19
Figura 6. Comparación de los resultados experimentales y numéricos a lo largo del eje axial para (a) la velocidad axial U_y , (b) la energía cinética turbulenta k , (c) el tensor de Reynolds normal radial R_{xx} y (d) el tensor de Reynolds normal axial yy	20
Figura 7. Perfiles de velocidad axial U_y y radial U_x en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del <i>bluff-body</i>	21
Figura 8. Contornos de los resultados i) experimentales y ii) numéricos para la energía cinética turbulenta k (superior) y el tensor de Reynolds xy (inferior).....	23
Figura 9. Perfiles de energía cinética turbulenta k y el tensor de Reynolds cruzado xy en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del <i>bluff-body</i>	24
Figura 10. Contornos de los resultados i) experimentales y ii) numéricos para el tensor de Reynolds xx (superior) y el tensor de Reynolds yy (inferior).	25
Figura 11. Perfiles de los tensores normales en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del <i>bluff-body</i>	27
Figura 12. Contornos de OH i) experimental y ii) numérico.....	28

Figura 13. Contornos de OH y perfiles de OH en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del *bluff-body*.....29



Introducción

La combustión en la actualidad es un fenómeno importante para el desarrollo de la sociedad debido a que representa alrededor del 80% de la energía consumida en diversas actividades humanas (Law, 2006). Sin embargo, el problema que trae consigo es la formación de especies químicas gaseosas dañinas, como por ejemplo CO_2 y NO_x que son las causantes del deterioro del planeta y causante de diversas enfermedades respiratorias y cardiovasculares (Bourdrel et al., 2017). Estudios continuos para entender la combustión y la formación de las especies químicas durante este fenómeno son importantes para el diseño de equipos térmicos y quemadores cada vez más eficientes.

Dos categorías son consideradas en el estudio de la combustión de combustibles gaseosos. Por un lado, la combustión premezclada en la cual el combustible y el oxidante son mezclados antes del ingreso a la cámara de combustión y, por otro lado, la combustión no premezclada o difusiva en la cual el combustible gaseoso y el oxidante ingresan por ductos separados a la cámara de combustión y posterior a ello son mezclados por difusión antes de la combustión. Esta última categoría está presente en muchos sistemas industriales debido a las ventajas que presenta con respecto a la combustión pre-mezclada. Por ejemplo, el diseño y la construcción de los quemadores para este tipo de combustión es más sencillo. También su operación es más segura, ya que no cuentan con una velocidad de propagación de la llama evitando que pueda retroceder o encenderse en zonas no deseadas (Poinsot & Veynante, 2012). Por estas dos principales razones, esta categoría de combustión es objeto de estudio del presente trabajo.

La combustión turbulenta es un proceso complejo ya que involucra turbulencia, flujo compresible, y reacciones químicas. *Computational Fluid Dynamics* (CFD) permite realizar el estudio de la turbulencia, las reacciones químicas y transferencia de calor en un flujo reactivo turbulento sin la necesidad de implementar equipos de laboratorio costosos. Existen diversos

softwares que permiten el estudio de la combustión y estos pueden ser comerciales o de código abierto. Un software de código abierto como el OpenFOAM es un poco más laborioso de entender y usar, pero permite obtener capacidades de simulación similares a un software de uso comercial y a un precio considerable menor ya que no incluye costo de licencia de uso.

En el modelamiento de una llama difusiva turbulenta existen dos abordajes numéricos: *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS) y *Large Eddy Simulation* (LES). Los modelos RANS tienen un costo computacional bastante menor en comparación con los modelos LES para obtener soluciones razonablemente precisas (Versteeg, H.K. and Malalasekera, 2007).

El modelo de combustión *Eddy Dissipation Concept* (EDC) es una versión modificada del modelo *Eddy Break-Up* (EBU) y fue introducido por Ertesvag y Magnussen. Este modelo toma en cuenta la química de la combustión incorporando un mecanismo cinético químico detallado, el cual tiene un gran impacto en el resultado de las simulaciones obtenidas y el costo computacional (Magnussen, 2005).

El objetivo principal de este trabajo es el estudio del modelo de combustión EDC presente en OpenFOAM para el estudio de un flujo reactivo turbulento. Los datos experimentales disponibles en la literatura de campos de velocidad, tensores de Reynolds y la especie química OH serán usados para validar el modelo estudiado.

Objetivos

Objetivo general

- Estudiar numéricamente el flujo turbulento reactivo en la estela próxima de un quemador tipo *bluff-body* usando el modelo de combustión EDC disponible en la herramienta computacional de código abierto OpenFOAM.

Objetivo Específicos

- Estudiar los fundamentos del modelo de combustión EDC.
- Modelar y simular numéricamente el flujo turbulento reactivo en una geometría de un quemador tipo *bluff-body* usando el modelo de combustión EDC.
- Caracterizar la estructura del flujo turbulento reactivo en la estela próxima del quemador.
- Analizar los resultados numéricos obtenidos teniendo como base los datos experimentales disponibles.

Metodología

La siguiente metodología es seguida para alcanzar los objetivos propuestos en este trabajo.

- **Revisión bibliográfica**

Al principio la revisión bibliográfica para entender los fundamentos físicos de flujos turbulentos reactivos y el uso de las herramientas computacionales (CFD) para describir numéricamente dichos flujos es importante. Posteriormente la revisión de información específica sobre el modelo de combustión EDC en libros y revistas científicas es realizada de manera continua. De forma paralela el código de combustión del modelo EDC presente en el software de código abierto OpenFOAM es tratado.

- **Definición de geometría y generación de la malla computacional del quemador tipo *bluff-body* en OpenFOAM**

La malla a ser usada en el presente trabajo será definida de acuerdo a la geometría del quemador usado en las mediciones experimentales. Luego, un dominio computacional que origine una solución convergida sin que sus dimensiones afecten los resultados finales es buscado mediante una serie de simulaciones en flujo inerte y reactivo. Una vez verificada esta condición en la malla computacional, las condiciones de borde usadas en los experimentos son replicadas para realizar las simulaciones numéricas.

- **Caracterización de la estructura del flujo turbulento inerte y reactivo**

Una vez obtenidas las simulaciones numéricas estas son procesadas y posteriormente son analizadas exhaustivamente. La estructura del flujo turbulento reactivo de cada caso simulado será caracterizada mediante la extracción de datos de perfiles de velocidad, tensores de Reynolds y fracción de masa de algunas especies químicas como, por ejemplo, OH.

- **Análisis y conclusión de resultados**

Luego de la caracterización de las simulaciones numéricas, los distintos casos serán analizados tomando como punto de referencia los resultados experimentales disponibles. Unos resultados cercanos a los experimentales en campos de velocidad, tensores de Reynolds y OH son buscados a través de la retroalimentación y mejora continuas. A partir de este análisis las conclusiones sobre el trabajo realizado serán realizadas.



Capítulo 1. Formulación matemática

En este capítulo las ecuaciones fundamentales para describir el flujo reactivo turbulento estudiado son presentadas. Luego el modelo de turbulencia k-omega tipo RANS, el modelo de combustión EDC y el modelo de radiación P-1 usadas en el modelamiento numérico son descritas.

1.1. Ecuaciones fundamentales de la dinámica de fluidos

Las ecuaciones fundamentales para describir un fluido compresible Newtoniano son expresadas a través de la ecuación de conservación de masa o continuidad,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

la ecuación de conservación de cantidad de movimiento,

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial(\tau_{ij})}{\partial x_j} + F, \quad (2)$$

donde τ_{ij} es el tensor de esfuerzos viscosos expresado como,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (3)$$

y F es un término fuente de la ecuación de momento el cual podría incluir la gravedad (Versteeg, H.K. and Malalasekera, 2007). En estas ecuaciones u_i es la componente del vector velocidad en la dirección Cartesiana, x_i es la dirección cartesiana, ρ es la densidad, p es la presión, μ es la viscosidad dinámica y δ_{ij} es el delta de Kronecker.

La ecuación de energía es expresada como,

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{1}{Sc_s} - \frac{1}{\sigma_h} \right) \sum_{s=1}^N h_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial t} + S_{rad} + S_{comb}, \quad (4)$$

donde Sc_s es el número de Schmidt de cada especie, σ_h es el número de Prandtl de la mezcla, h es la entalpía de la mezcla, S_{rad} es el término fuente de radiación y S_{comb} es el término fuente de combustión.

El número de Schmidt es calculado como,

$$Sc_s = \frac{\mu}{\rho D_s}, \quad (5)$$

donde D_s es el coeficiente de difusión de la especie química.

El número de Prandtl de la mezcla es calculado como,

$$\sigma_h = \frac{\mu C_p}{k_c}, \quad (6)$$

donde k_c es la conductividad térmica de la mezcla.

La entalpía de la mezcla y la entalpía de cada especie es calculada como,

$$h = \sum_{s=1}^N Y_s h_s, \quad (7)$$

$$h_s = h_0 + \int_{T_0}^T C_{p,s}(T) dT, \quad (8)$$

donde h_0 es la entalpía de formación de la especie, y $C_{p,s}$ la capacidad calorífica de la especie s .

Otras relaciones importantes son las siguientes:

La fracción de masa total del combustible, oxidante y especies inertes es igual a 1,

$$\sum_{s=1}^N Y_s = 1. \quad (9)$$

La temperatura puede ser calculada por medio de la entalpía por medio de,

$$T = \frac{h - \sum_{F=1}^F Y_F h_F}{\bar{C}_p}, \quad (10)$$

donde Y_F es la fracción de masa de las especies del combustible, y h_F es la entalpía de combustión.

El valor promedio de la capacidad calorífica de la mezcla \bar{C}_p es definido como,

$$\bar{C}_p = \frac{1}{T - T_{ref}} \int_{T_0}^T C_p dT, \quad (11)$$

donde C_p es definida como,

$$C_p = \sum_{s=1}^N Y_s C_{p,s}. \quad (12)$$

La densidad local de la mezcla es dependiente de la presión, la concentración de reactantes y productos y la temperatura de la mezcla. La ecuación de estado es calculada como,

$$\rho = \frac{p}{R_u T \sum_s^N \frac{Y_s}{(MW)_s}}, \quad (13)$$

donde $(MW)_s$ es el peso molecular de las especies s and R_u es la constante universal de los gases 8.314 kJ/kmol.K.

La primera ecuación de transporte que es específica de flujos reactivos es la ecuación de conservación de masa de las especies s ,

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i Y_s)}{\partial x_i} = \frac{\partial [\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i}]}{\partial x_i} + \omega_s, \quad (14)$$

donde, ω_s es el término fuente de cada ecuación de transporte de cada especie química y hace referencia a la velocidad volumétrica de generación o destrucción de las especies debido a las reacciones químicas.

La formulación de las ecuaciones *Reynolds Average Navier–Stokes* (RANS) para flujo compresible es usada en este trabajo. El método de promedio de Favre es utilizado para simplificar las ecuaciones de transporte y tomar en cuenta el cambio de la densidad durante el promedio. El siguiente conjunto de ecuaciones de promedio Favre es usado para simular flujo reactivo turbulento.

Las ecuaciones RANS de continuidad, momentos, energía y fracción de masa de especies son expresadas como,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u''_i u''_j})}{\partial x_i}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h})}{\partial x_j} = \frac{\partial [(\frac{\mu}{\sigma_h} + \frac{\mu_t}{\sigma_h^t}) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}]}{\partial x_j} + \bar{S}_{rad} + \bar{S}_{comb}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_s}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_s)}{\partial x_j} = \frac{\partial [(\frac{\mu}{Sc_s} + \frac{\mu_t}{Sc_s^t}) \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j}]}{\partial x_j} + \omega_s, \quad (18)$$

donde $\overline{\rho u''_i u''_j}$ es el tensor de Reynolds, μ_t es la viscosidad turbulenta, σ_h^t es el número de Prandtl turbulento y Sc_s^t es el número de Schmidt turbulento para cada especie.

1.2. Modelo de turbulencia

Los tensores de Reynolds toman en cuenta la transferencia de momento que es causada por la fluctuación de la velocidad en flujo turbulento. El modelamiento de la turbulencia logra el cierre de los términos relacionados a los tensores de Reynolds en las ecuaciones de momento de promedio Favre. El modelo k-omega es usado en el presente trabajo ya que permite describir mejor el comportamiento del flujo cerca de la superficie de las paredes (Versteeg, H.K. and Malalasekera, 2007). Esto permite describir mejor el comportamiento del flujo del combustible

en el ducto del inyector previo al ingreso a la zona de interés del caso analizado. Como consecuencia, una velocidad de salida del combustible más cercana al experimental es obtenida y es posible validar de una mejor manera el modelo de combustión en la zona de reacción posterior.

El modelo k - ω fue inicialmente propuesto por Wilcox e incluye dos ecuaciones de transporte, una para la energía cinética turbulenta (k) y otra para la tasa de disipación turbulenta (ω) (Wilcox, 1988),

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}k\tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k^t})\frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j}]}{\partial x_j} + G_k - Y_k + S_k, \quad (19)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\omega})}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{\omega}\tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega^t})\frac{\partial\tilde{\omega}}{\partial x_j}]}{\partial x_j} + G_\omega - Y_\omega + S_\omega, \quad (20)$$

donde μ_t es la viscosidad turbulenta, σ_k^t y σ_ω^t representan los números de Prandtl turbulento para k y ω , respectivamente, G_k y G_ω representan la generación de k y ω , respectivamente, Y_k y Y_ω representan las disipaciones de k y ω , respectivamente, y S_k y S_ω representan los términos fuentes de k y ω , respectivamente.

1.3. Modelo de combustión

El modelo *Eddy Dissipation Concept* (EDC) es un modelo químico detallado que puede ser usado mientras la cinética química o de la mezcla domina las velocidades de reacción. Es decir, el modelo calcula el efecto de la cinética de reacción y de la mezcla hasta la combustión, y luego usa el valor más pequeño para determinar la velocidad de reacción. Las estructuras finas en flujos turbulentos es una pequeña fracción del volumen total del fluido donde ocurren la mezcla molecular y la disipación de la energía cinética turbulenta en calor. De acuerdo al modelo EDC las reacciones químicas toman lugar en las estructuras finas mientras exista una

mezcla y temperatura adecuada. La fracción de masa de las estructuras finas es definido como (Magnussen, 2005),

$$y = C_y \left(\frac{\nu \tilde{\varepsilon}}{k^2} \right)^{1/4}. \quad (21)$$

Y el tiempo de residencia medio dentro de las estructuras finas es expresado como,

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\tilde{\varepsilon}} \right)^{1/2}, \quad (22)$$

donde ν es la viscosidad cinemática y ε es la disipación de la energía cinética turbulenta k . Las constantes de volumen de estructuras finas y tiempo de residencia son $C_y = 2.1377$ y $C_\tau = 0.4803$.

La tasa de reacción medio para el término fuente de la ecuación de transporte de las especies ha tenido varias formulaciones hasta el día de hoy (Li et al., 2017). La formulación realizada por Magnussen en el 2005 y que está presente en OpenFOAM como EDC2005 es usada en el presente trabajo. Aquí la tasa de reacción media es calculada como,

$$\tilde{\omega} = - \frac{\bar{\rho} y^2}{(1 - y^2)} \frac{(\tilde{Y}_s - \tilde{Y}_s^*)}{\tau^*}, \quad (23)$$

donde \tilde{Y}_s es la fracción de masa de las especies que es resuelta de su ecuación de transporte individual y \tilde{Y}_s^* es la fracción de la especie en la zona de reacción y es calculada con un enfoque de química rápida o detallada.

1.4. Modelo de radiación

El modelo de aproximación P-1 es usado para evaluar la transferencia de calor por radiación. Este modelo usa armónicos esféricos para el cálculo de la radiación incidente. El flujo de radiación es calculado como (Ghasemi et al., 2014),

$$\vec{q}_r = -\frac{1}{3\kappa}\nabla G, \quad (24)$$

donde G es la radiación incidente. La siguiente expresión para $-\nabla \cdot q_r$ puede ser directamente sustituido en la ecuación de energía como término fuente de radiación,

$$-\nabla \cdot q_r = \kappa G - 4\kappa\sigma T^4, \quad (25)$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann ($5.67 \times 10^{-8} \text{W/m}^2\text{K}$) y κ es el coeficiente de absorción.



Capítulo 2. Modelamiento numérico

En este capítulo el modelamiento numérico de un caso de una llama difusiva turbulenta en OpenFOAM es tratado. El solucionador y esquemas numéricos, la configuración geométrica, la generación de la malla computacional y las condiciones de contorno usadas son explicados.

2.1. Solucionador y esquemas numéricos

El solucionador usado durante los cálculos es *reactingFoam*. Este utiliza el algoritmo flexible PIMPLE (PISO-SIMPLE) que es una combinación de los algoritmos PISO (*Pressure implicit with splitting of operator*) y SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*). Asimismo, la discretización de todas las ecuaciones de transporte es realizada usando una interpolación lineal el cual tiene una precisión de segundo orden. El uso de factores relajación para las ecuaciones de transporte de las especies es necesario debido a la fuerte relación existente entre la fracción de masa de las especies y la ecuación de energía y, por lo tanto, la densidad. Los datos de la cinética química son proporcionados por el mecanismo cinético GRI-MECH3.0 de 53 especies químicas y 325 reacciones. Este es un mecanismo optimizado diseñado para modelar la combustión de gas natural, incluida la formación de NO y la química de regeneración.

2.2. Configuración geométrica

La geometría de la malla usada es similar al quemador coaxial de jet usado en el experimento realizado por Nattan Caetano y Luis Fernando Figueira da Silva (Caetano & Figueira da Silva, 2015). El esquema de este quemador tipo *bluff-body* es mostrado en la Figura 1. Como es mostrado en la Figura 2, el dominio computacional total de la cámara de combustión tiene una longitud total de 240 mm y un diámetro de 327 mm. El dominio de interés es extendido 80 mm posterior al ingreso del combustible y con un diámetro de 90 mm. Las

mediciones de los datos experimentales disponibles, que son tomadas como punto de referencia para las comparaciones y el análisis de los diferentes parámetros de interés, son realizadas en la región cercana al *bluff-body*.

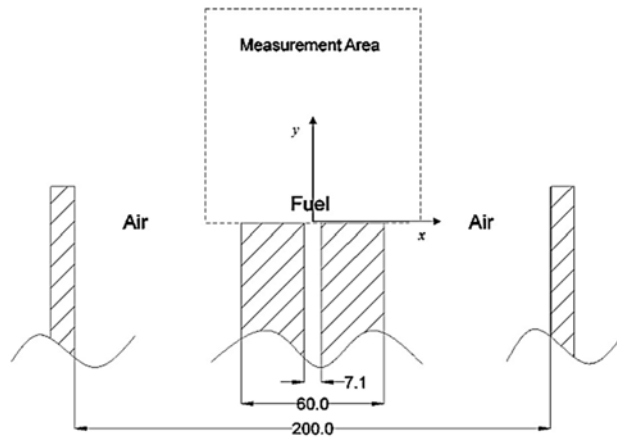


Figura 1. Esquema del quemador tipo *bluff-body* con dimensiones en mm usado en los experimentos realizados por Nattan Caetano.

Tomado de “*A comparative experimental study of turbulent non premixed flames stabilized by a bluff-body burner*”, por Caetano, N. y Figueira da Silva, L., 2014.

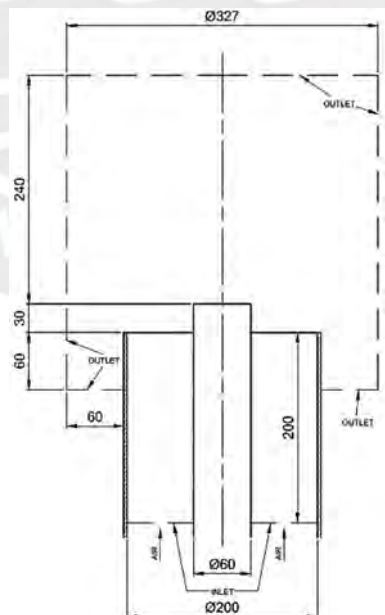


Figura 2. Configuración geométrica y dominio computacional con dimensiones en mm.

2.3. Generación de malla computacional

La malla computacional fue generada usando el comando *blockMesh* presente en OpenFOAM de acuerdo a la configuración geométrica descrita anteriormente. Una malla hexaédrica y estructurada la cual es mostrada en la Figura 3 es usada para la discretización del dominio. La calidad de la malla es importante para obtener buenos resultados en las simulaciones. La relación de aspecto (*aspect ratio*) y la no-ortogonalidad (*non-orthogonality*) son los parámetros más importantes para medir la calidad de la malla. La no-ortogonalidad máxima de la malla cuyo valor es menor que los valores máximos recomendados de $30^\circ - 40^\circ$ es verificada con el comando *checkMesh* en OpenFOAM. Las tasas de deformación significativas son esperadas en la región de interés donde un mayor refinamiento de la malla es logrado con la relación de aspecto.

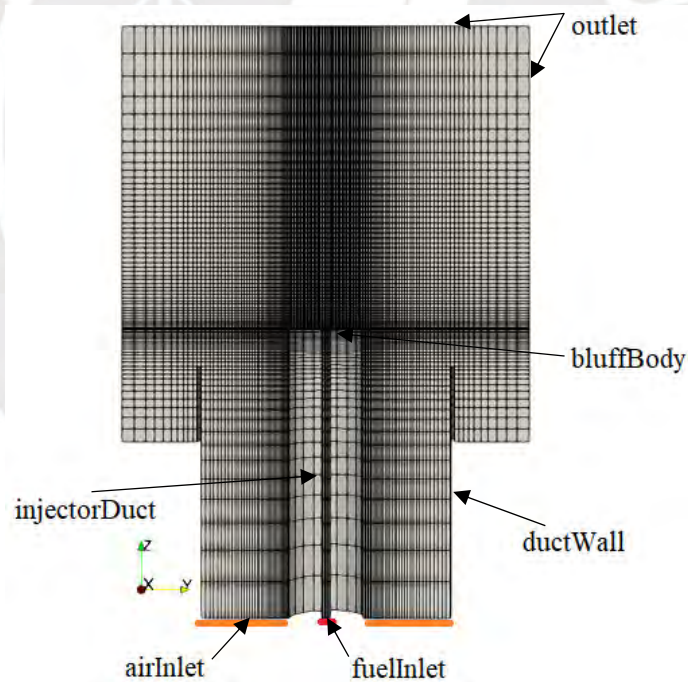


Figura 3. Malla computacional indicando los *patches* definidos para las condiciones de borde en OpenFOAM.

2.4. Condiciones de contorno

Las velocidades de ingreso del combustible y el aire son establecidas como condiciones de borde en sus respectivos ductos a aproximadamente 200 mm por debajo de la cámara de combustión. Estas condiciones de borde de velocidad están de acuerdo con el flujo volumétrico y las velocidades usadas en los experimentos, esto es importante para posteriormente comparar y validar el modelo usado. El metano ingresa a una velocidad media de 5.3 m/s en un régimen laminar. El flujo anular es el aire como oxidante que ingresa a una velocidad media de 8 m/s. La presión en todo el dominio computacional es 100 000 Pa. Las temperaturas del combustible y del oxidante son 300 K. La Tabla 1 es elaborada con las principales condiciones de borde de ingreso de combustible y oxidante usadas en las simulaciones.

Tabla 1.

Resumen de las condiciones de ingreso del combustible y oxidante.

	di (mm)	D (mm)	U _z (m/s)	T (K)	Fracción de masa de las especies		
					CH ₄	O ₂	N ₂
fuelInlet	-	7,1	5,3	300	1	0	0
airInlet	60	200	8	300	0	0.23	0.77

Una condición de no deslizamiento es especificada para las paredes de los ductos de ingreso de combustible y oxidante. La salida es modelada con una presión total de salida de 100 000 Pa. Condiciones de funciones de paredes es aplicada para las variables de k y ω . Para las ecuaciones de transporte de p , T y las especies, una condición de gradiente cero es aplicada en las paredes de los ductos y la salida. La Tabla 2 es elaborada con el resumen de las condiciones de borde en los *patches* de la malla computacional.

Tabla 2.

Resumen de las condiciones de borde usadas en OpenFOAM para los ductos y la salida del dominio computacional.

	U (m/s)	P (Pa)	T (K)	k (m ² /s ²)	omega (m ² /s ³)	Y _s
bluffBody	noSlip	zG	zG	kLowRe WallFunction	Omega WallFunction	zG
injectorDuct	noSlip	zG	zG	kLowRe WallFunction	Omega WallFunction	zG
ductWall	noSlip	zG	zG	kLowRe WallFunction	Omega WallFunction	zG
outlet	pressureInlet OutletVelocity	totalPressure	zG	zG	zG	zG



Capítulo 3. Resultados y discusiones

En este capítulo todos los resultados numéricos obtenidos son comparados y analizados en términos cualitativos y cuantitativos con las mediciones experimentales realizadas por Nattan Caetano y Luis Fernando Figueira da Silva (Caetano & Figueira da Silva, 2015). Los principales parámetros analizados son las componentes de la velocidad, la energía cinética turbulenta (k), los tensores de Reynolds y la especie química OH.

3.1. Análisis de independencia de malla

Una serie de simulaciones es realizada inicialmente en mallas con diferente número de elementos buscando encontrar una malla que garantice su independencia, es decir, que los resultados obtenidos no sean afectados por la calidad de la malla utilizada. De acuerdo a la Figura 4 una malla con un número total de 900 mil celdas asegura una solución independiente.

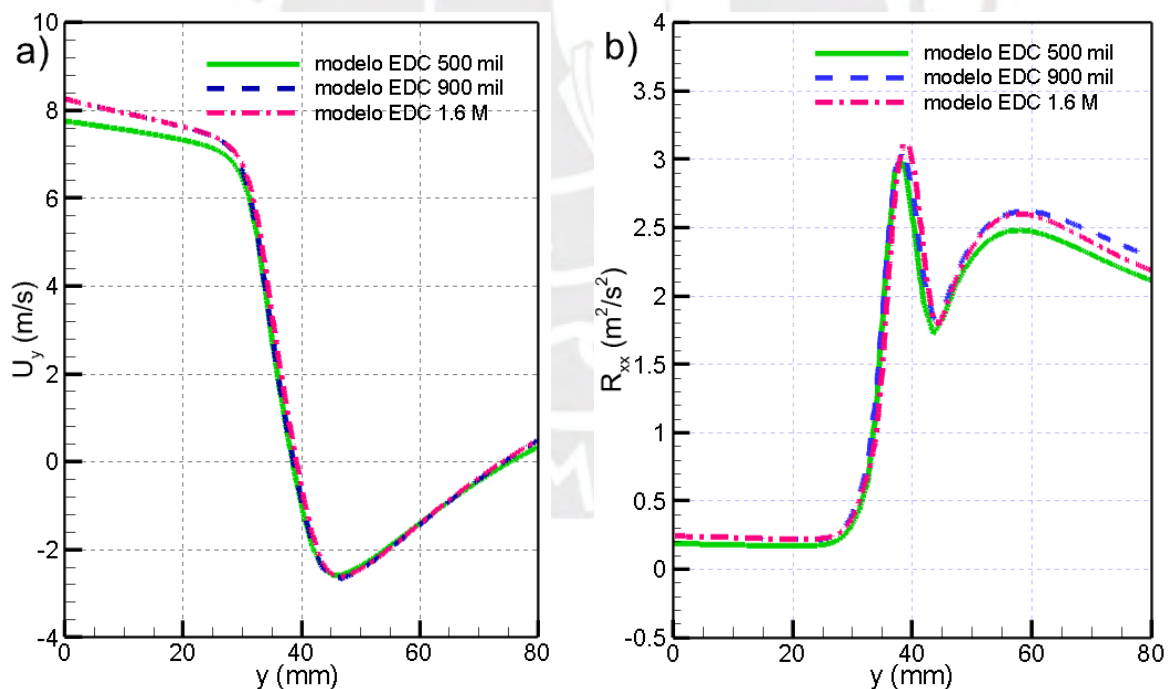


Figura 4. Resultados numéricos obtenidos para (a) velocidad U_y y (b) perfil de tensor de Reynolds normal radial (R_{xx}) con diferentes mallas.

3.2. Comparación de los campos medios de velocidad

Los contornos experimentales y numéricos de las componentes axial y radial de la velocidad media son mostrados en la Figura 5. En la parte superior, la velocidad axial obtenida con el modelo EDC del jet central muestra un punto de estancamiento diferente al mostrado en el experimento. En la parte inferior, un buen parecido entre resultados experimentales y numéricos es observado de manera general en la componente radial de la velocidad. En ambos casos existe una presencia de una zona de recirculación.

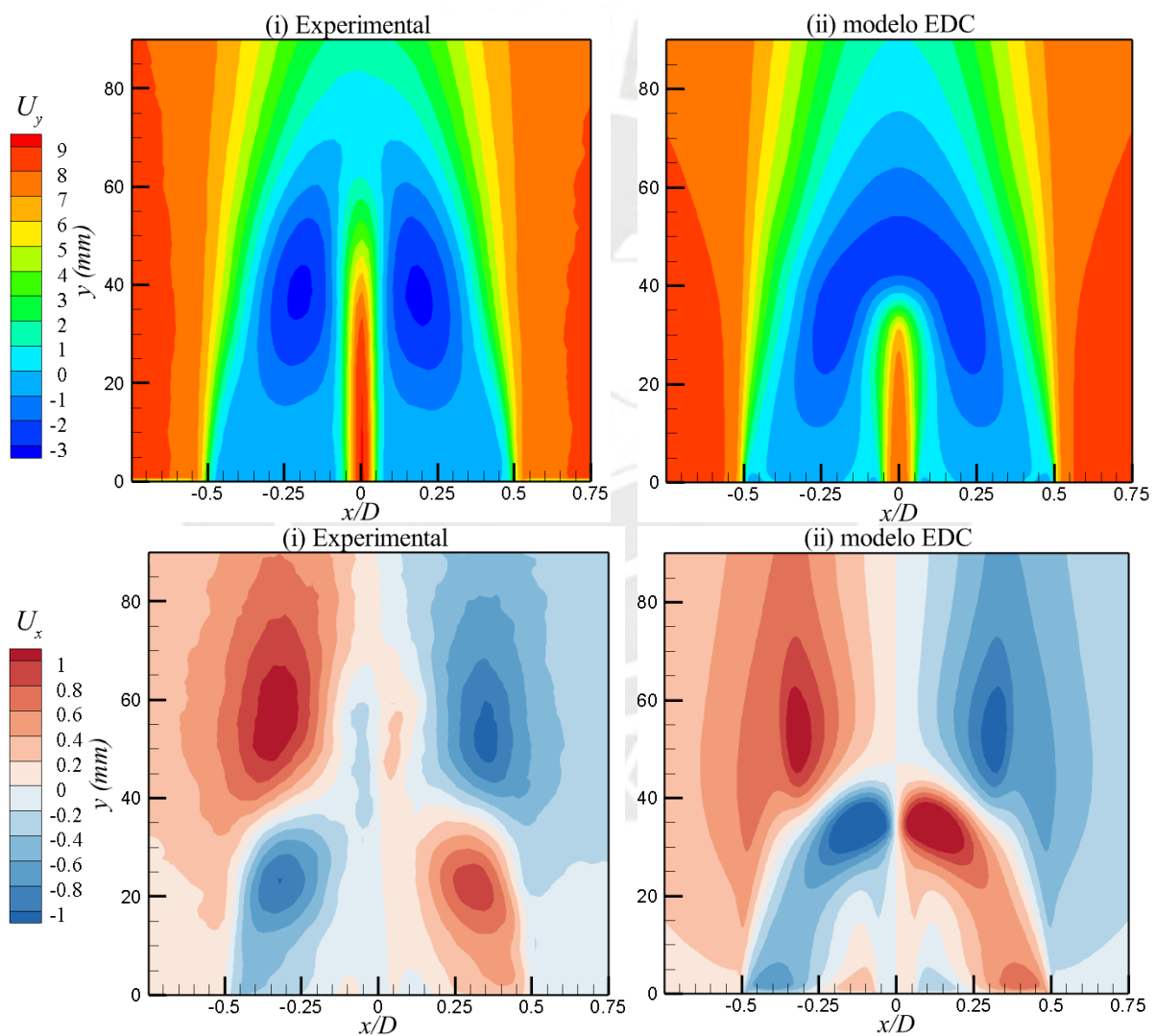


Figura 5. Contornos de los resultados (i) experimentales y (ii) numéricos para la componente de la velocidad axial U_y (superior) y la componente de la velocidad radial U_x (inferior).

La comparación de la velocidad axial U_y a lo largo del eje axial hasta 80 mm por encima del *bluff-body* es mostrada en la Figura 6 a). La velocidad axial obtenida de ingreso del flujo del combustible es 8.5 m/s el cual es 5.5% menos que el valor de 9 m/s mostrado en el experimento. La tendencia de ambos resultados es la misma; sin embargo, la pendiente de la curva numérica es más pronunciada. Esto genera un punto de estancamiento en $y = 40$ mm aproximadamente, y un cambio en la dirección de la velocidad llegando hasta el valor de -2.5 m/s en $y = 45$ mm. Esto es diferente al experimento que muestra una velocidad axial próxima a cero en $y = 70$ mm, pero no existe cambio de dirección.

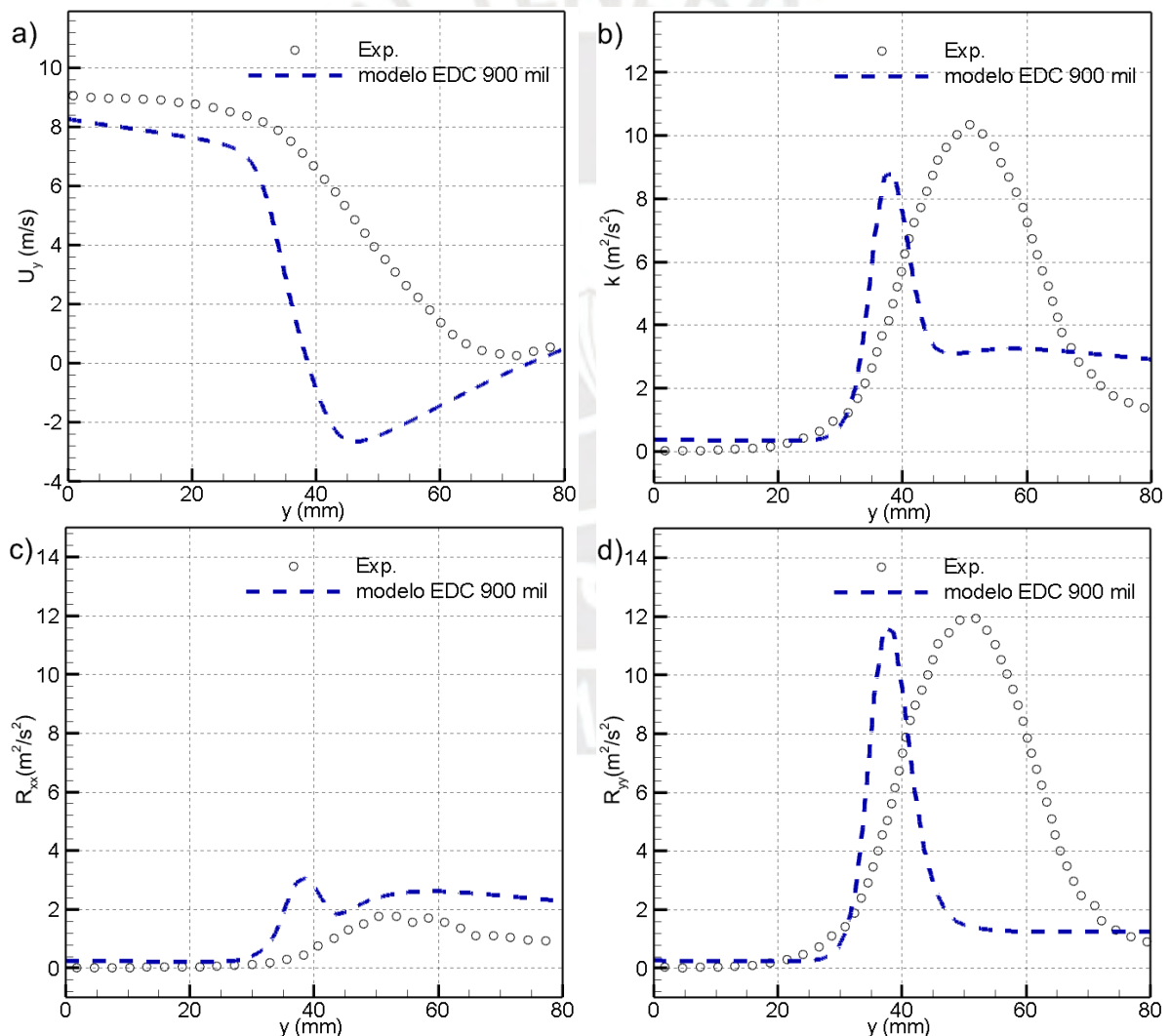


Figura 6. Comparación de los resultados experimentales y numéricos a lo largo del eje axial para (a) la velocidad axial U_y , (b) la energía cinética turbulenta k , (c) el tensor de Reynolds normal radial R_{xx} y (d) el tensor de Reynolds normal axial yy .

La comparación de la velocidad axial U_y y radial U_x en diferentes posiciones axiales por encima *del bluff-body* es mostrada en la Figura 7. Los resultados obtenidos para la velocidad axial U_y en la zona de recirculación tienen valores cercanos y siguen la tendencia de los datos experimentales. Sin embargo, la marcada diferencia en la línea de centro, $x/D = 0$, explicada anteriormente también es observada. Por ejemplo, en $y = 50 \text{ mm}$ una velocidad axial de -2 m/s en $x/D = 0$ es obtenida mientras que el experimento indica una velocidad en dirección contraria y dos veces mayor de 4 m/s .

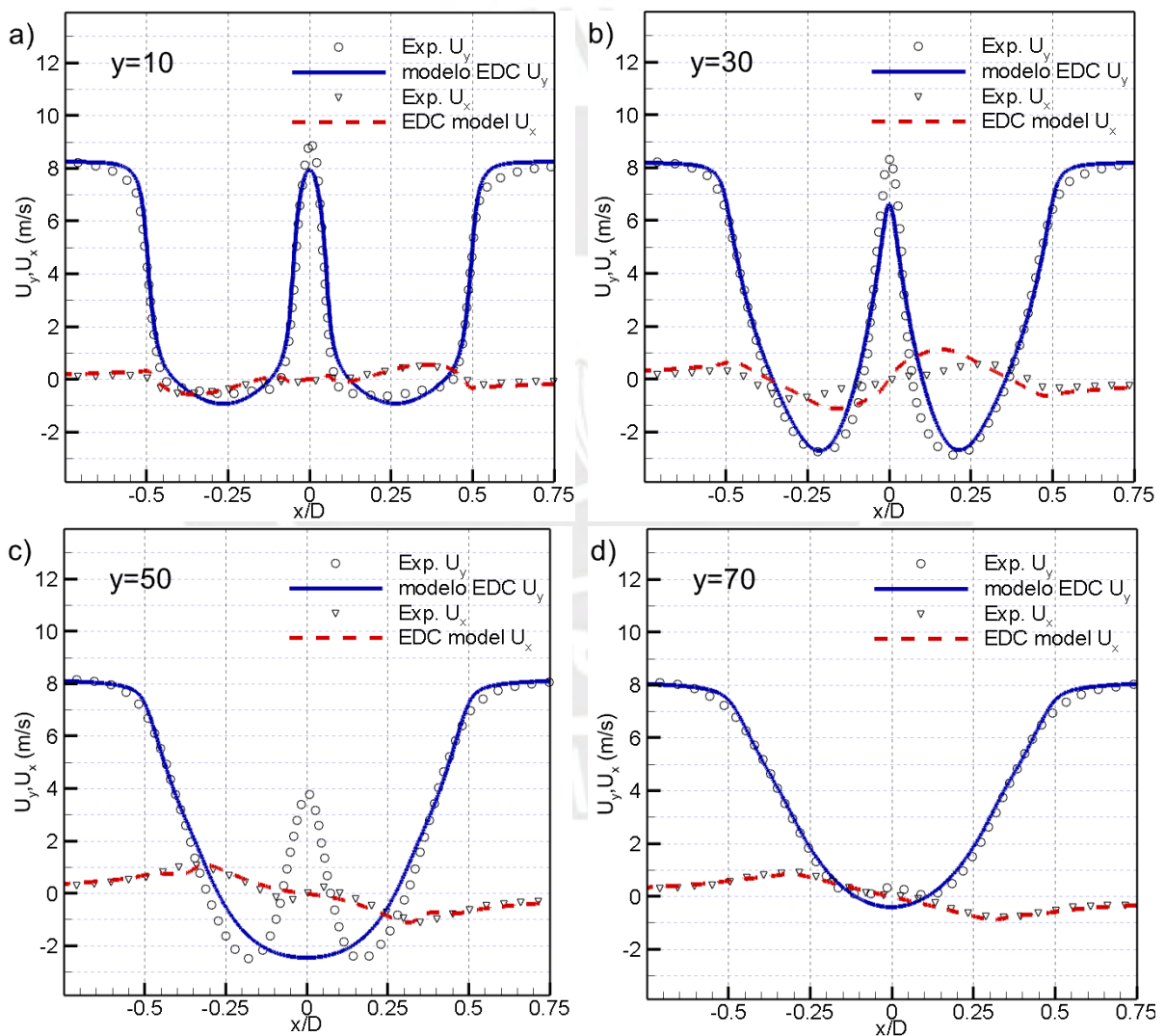


Figura 7. Perfiles de velocidad axial U_y y radial U_x en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del *bluff-body*.

El hecho de que exista una diferencia de 0.5 m/s (5.5%) entre las velocidades de ingreso a la cámara de combustión es una de las razones por la cual no existe una muy buena relación entre los datos numéricos y experimentales en esta variable en el eje axial.

Para la velocidad radial U_x los valores máximos y mínimos obtenidos no difieren mucho con los experimentos. Los resultados numéricos guardan una mejor relación con el experimento en la posición $y = 10 \text{ mm}$. Por el contrario, en $y = 30 \text{ mm}$ existe una mayor desviación con respecto al experimento. Esto es debido a que en esta posición existe una zona de recirculación difícil de predecir y que es afectada por la poca relación de la velocidad axial en el eje axial con el experimento.

3.3. Comparación de la energía cinética turbulenta y los tensores de Reynolds

En la Figura 8 los contornos de energía cinética turbulenta k y el tensor de Reynolds cruzado xy son mostrados. Para k existe coincidencia con la región de mayor energía cinética turbulenta, la cual está ubicada en la zona del punto de estancamiento del flujo de combustible. Además de la diferencia de la ubicación de este punto con respecto al experimento, los resultados obtenidos muestran una cantidad mayor de energía en la zona de recirculación. Para el tensor de Reynolds cruzado xy los resultados obtenidos muestran una buena relación con el experimento.

En la Figura 6 b) la comparación de la energía cinética turbulenta en el eje axial es mostrado. La energía máxima obtenida está ubicada aproximadamente en $y = 38 \text{ mm}$ que es cercano a $y = 40 \text{ mm}$ donde el fluido presenta un estancamiento y cambia de dirección. La alta fluctuación de velocidad y el cambio de dirección es lo que genera una alta cantidad de energía cinética en esta región. Sin embargo, en el experimento la energía máxima está ubicada aproximadamente en $y = 50 \text{ mm}$ a 20 mm de donde la velocidad del flujo es próxima a 0 en $y = 70 \text{ mm}$. También existe una diferencia entre los valores máximos de 18%, lo cual está

relacionado con la diferencia de 5.5% que es obtenida entre los valores de la velocidad axial de ingreso del jet central.

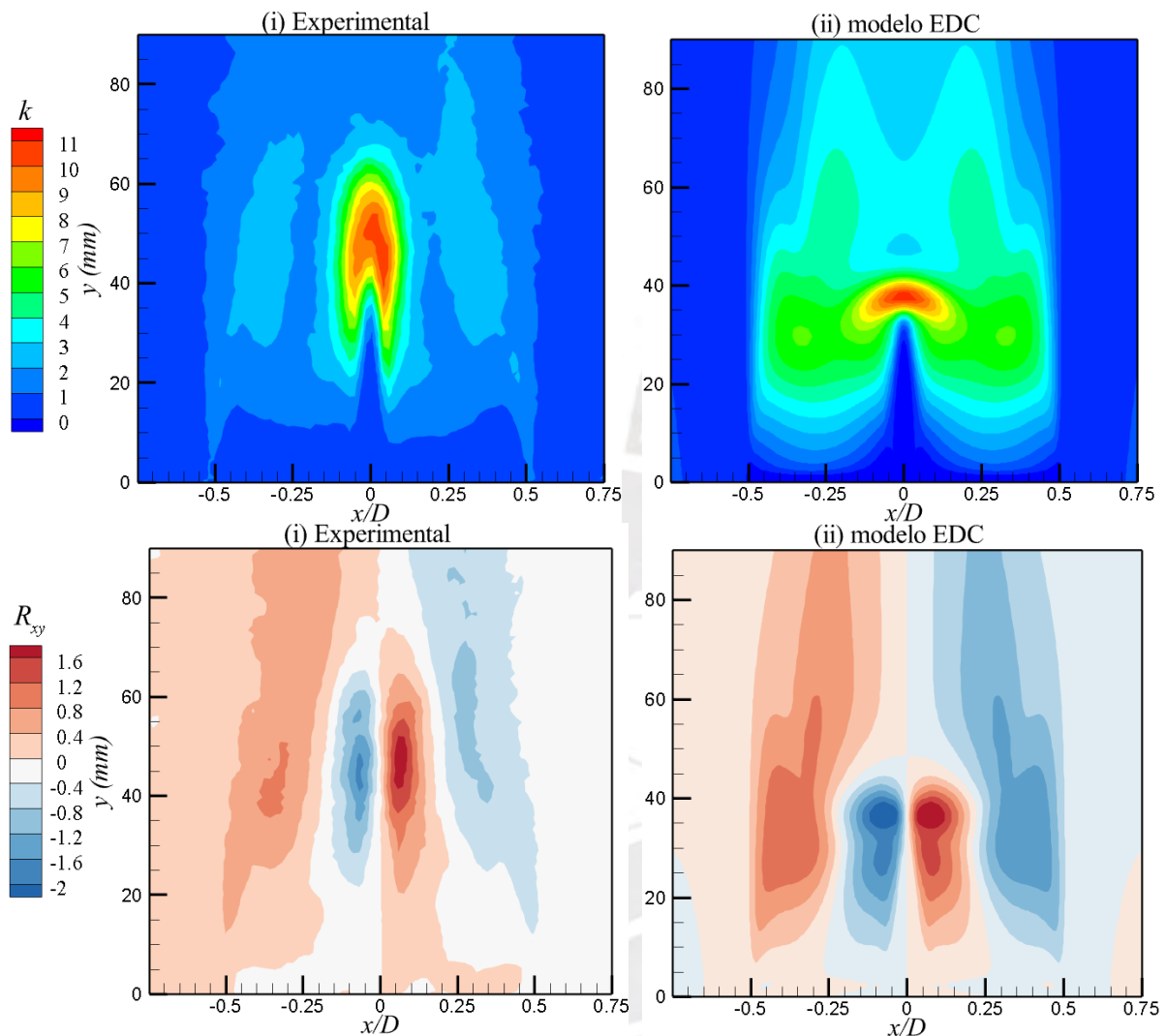


Figura 8. Contornos de los resultados i) experimentales y ii) numéricos para la energía cinética turbulenta k (superior) y el tensor de Reynolds xy (inferior).

La comparación de la energía cinética turbulenta k y el tensor de Reynolds cruzado xy en diferentes posiciones axiales por encima *del bluff-body* es mostrada en la Figura 9. Para k los resultados obtenidos muestran valores superiores en la zona de recirculación. Por ejemplo, en la posición $y = 30$ mm el valor de k obtenido es de $5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ en $x/D = 0.25$, mientras que en el experimento es $2 \text{ m}^2/\text{s}^2$, es decir 2.5 veces menos. También, en la posición $y = 50$ mm un valor de $3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es obtenido en $x/D = 0$, mientras el valor experimental en este punto

alcanza su valor máximo de $11 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Sin embargo, en $y = 10 \text{ mm}$ y $y = 30 \text{ mm}$ hay una buena coincidencia con los valores experimentales en $x/D = 0$.

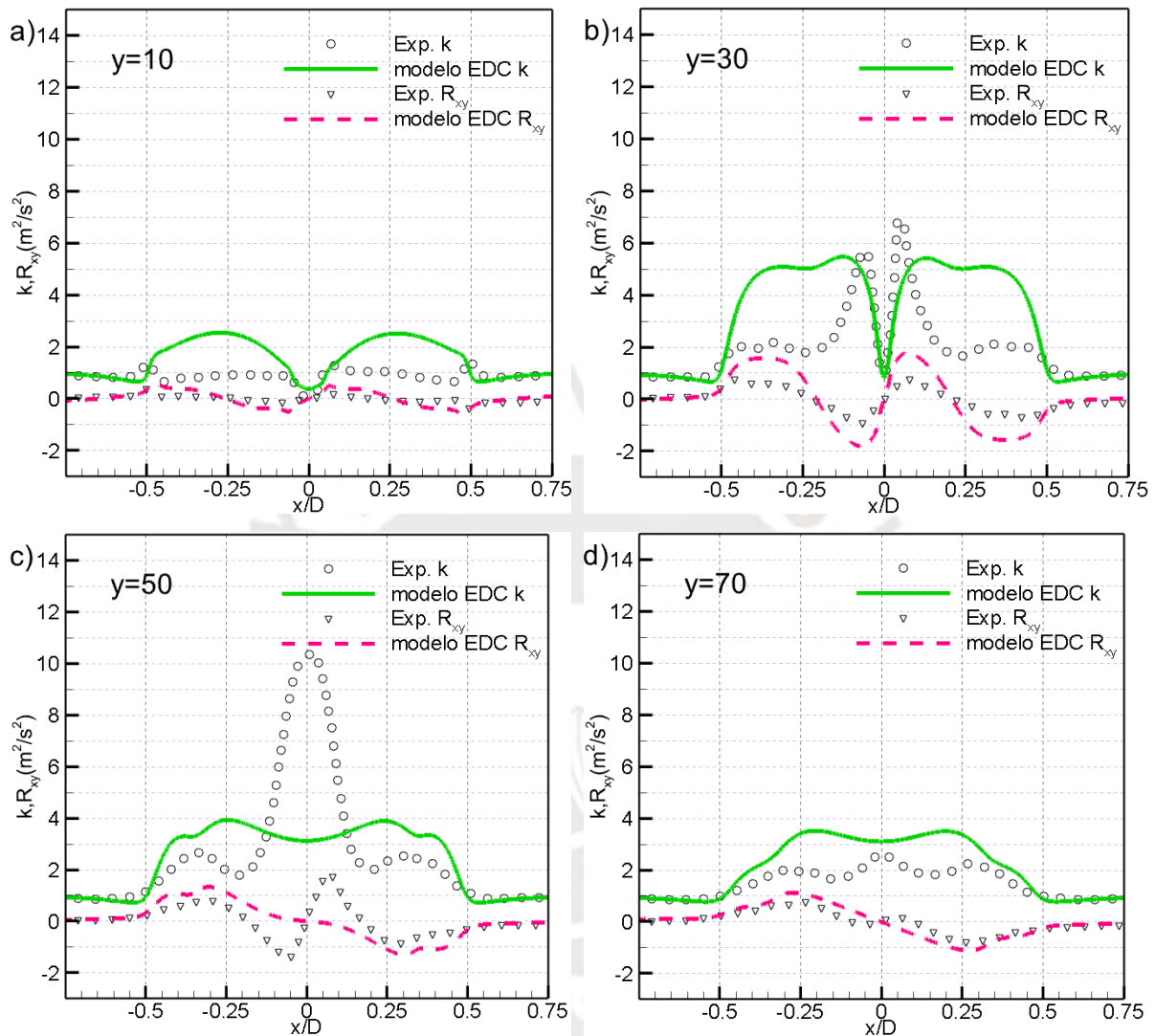


Figura 9. Perfiles de energía cinética turbulenta k y el tensor de Reynolds cruzado xy en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del *bluff-body*.

En la Figura 9 los perfiles experimentales y numéricos del tensor de Reynolds cruzado xy presentan tramos similares para los valores máximos y mínimos; sin embargo, estos valores no son tan cercanos. Esto ocurre, por ejemplo, en $y = 30 \text{ mm}$ donde el valor máximo del tensor cruzado en el experimento es $0,8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ pero el valor numérico obtenido alcanza valores de hasta $1,6 \text{ m}^2/\text{s}^2$, es decir el doble. Esto está relacionado, a que en este punto la energía cinética turbulenta también es sobrestimada. Debido a la fuerte relación que existe entre la energía

cinética turbulenta y los tensores de Reynolds por el modelo de turbulencia usado, los tramos donde la energía cinética turbulenta está más lejos de los datos experimentales coincide con los tramos en que ocurre lo mismo con el tensor cruzado.

En la Figura 10 los contornos del tensor de Reynolds normal xx e yy son mostrados. Los valores numéricos obtenidos para el tensor de Reynolds xx son superiores al experimento en la zona de recirculación. Para el tensor de Reynolds yy una buena relación con el experimento es observada de manera general.

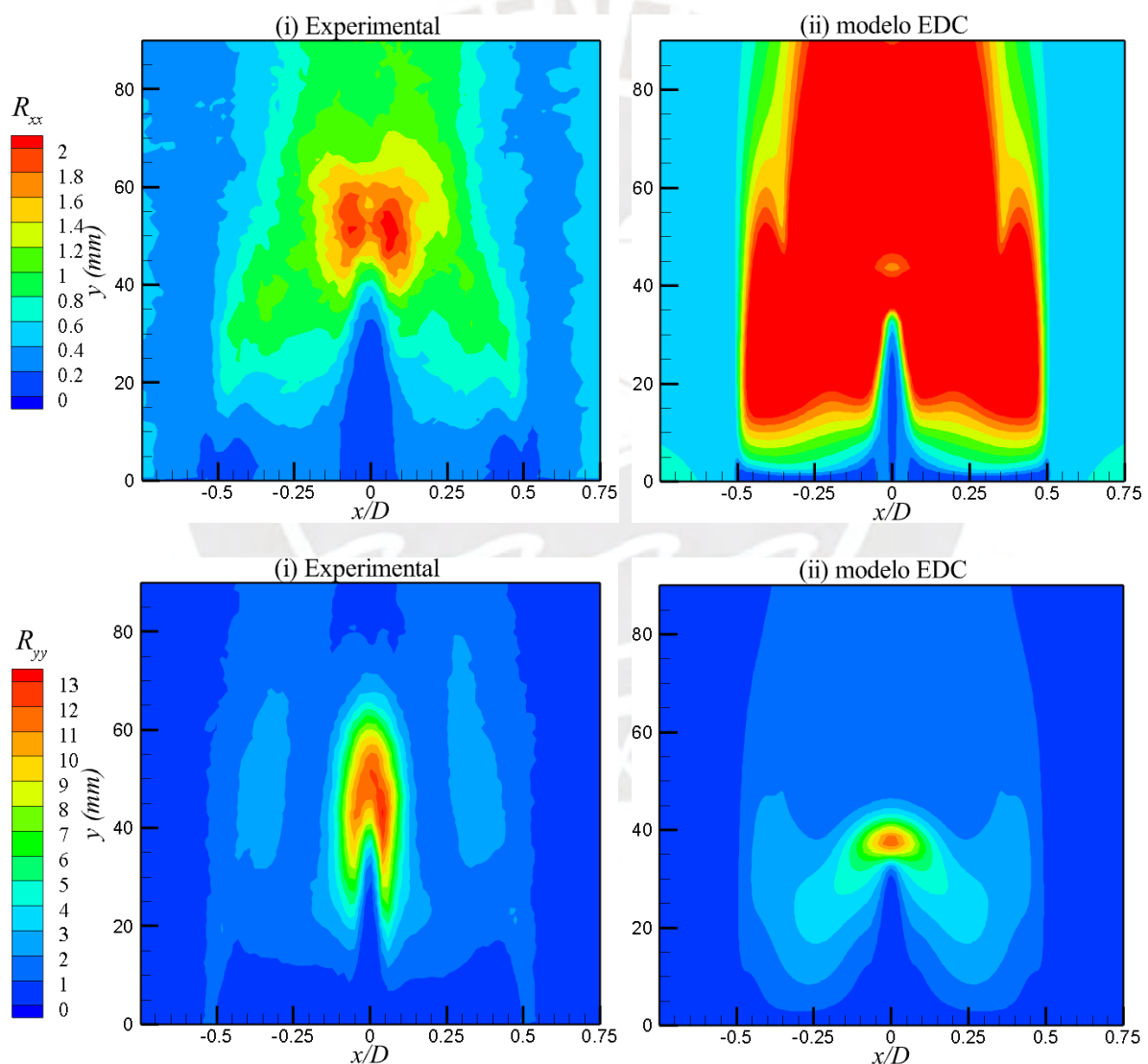


Figura 10. Contornos de los resultados i) experimentales y ii) numéricos para el tensor de Reynolds xx (superior) y el tensor de Reynolds yy (inferior).

En la Figura 6 c) y d) una buena relación de los tensores normales en el eje axial con el experimento es mostrada, a pesar que existe una diferencia entre los valores máximos y la posición en la que ocurre. En la posición $y = 38 \text{ mm}$ ocurre la máxima energía cinética turbulenta y los máximos valores para los tensores normales. Esto es justificado debido a que k es la mitad de la suma de los tensores normales en las tres direcciones.

Las comparaciones de los perfiles numéricos y experimentales de los tensores de Reynolds normales xx e yy en diferentes posiciones axiales son mostrados en la Figura 11. Para el tensor normal radial (R_{xx}), la tendencia del experimento es seguida, pero con valores numéricos superiores al experimento en todas las posiciones axiales fijas. Por ejemplo, en la posición $y = 30$ el valor obtenido es de $4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ en $x/D = 0.25$ mientras que el valor experimental es $1 \text{ m}^2/\text{s}^2$, es decir 4 veces menor. También ocurre que a partir de $y = 50 \text{ mm}$ los valores de la zona de cercana el eje axial, $x/D = 0$, no son descritos correctamente. Esto es observado mejor en la posición más alejada $y = 70 \text{ mm}$, donde valores de hasta $2.6 \text{ m}^2/\text{s}^2$ en $x/D = 0$ son alcanzados y en el experimento solo $1.2 \text{ m}^2/\text{s}^2$.

Para el tensor de Reynolds normal yy los valores numéricos tienden a seguir la tendencia del experimento en las posiciones axiales $y = 10 \text{ mm}$ y $y = 30 \text{ mm}$, logrando coincidir con los valores del experimento en la zona próxima a $x/D = 0$, pero mostrando valores mayores en la zona de recirculación. Por ejemplo, en $y = 10 \text{ mm}$ un valor de $2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es obtenido en $x/D = 0.25$ mientras que el valor del experimento es $1 \text{ m}^2/\text{s}^2$, es decir la mitad. Esta tendencia de obtener valores mayores a los experimentales en la zona de recirculación continua para la posición $y = 50 \text{ mm}$ y $y = 70 \text{ mm}$, pero además los valores obtenidos en la zona próxima a $x/D = 0$ presentan diferencias con respecto a los experimentales.

En comparación con el tensor normal radial, el tensor normal axial presenta valores numéricos más cercanos al experimental y tendencias más próximas. Los valores superiores al

experimental de los tensores normales en la zona de recirculación afectan negativamente a energía cinética turbulenta. De manera general, el modelo de turbulencia k - ω logra predecir el comportamiento de los parámetros de velocidad y tensores de Reynolds de un flujo reactivo turbulento de una manera aceptable.

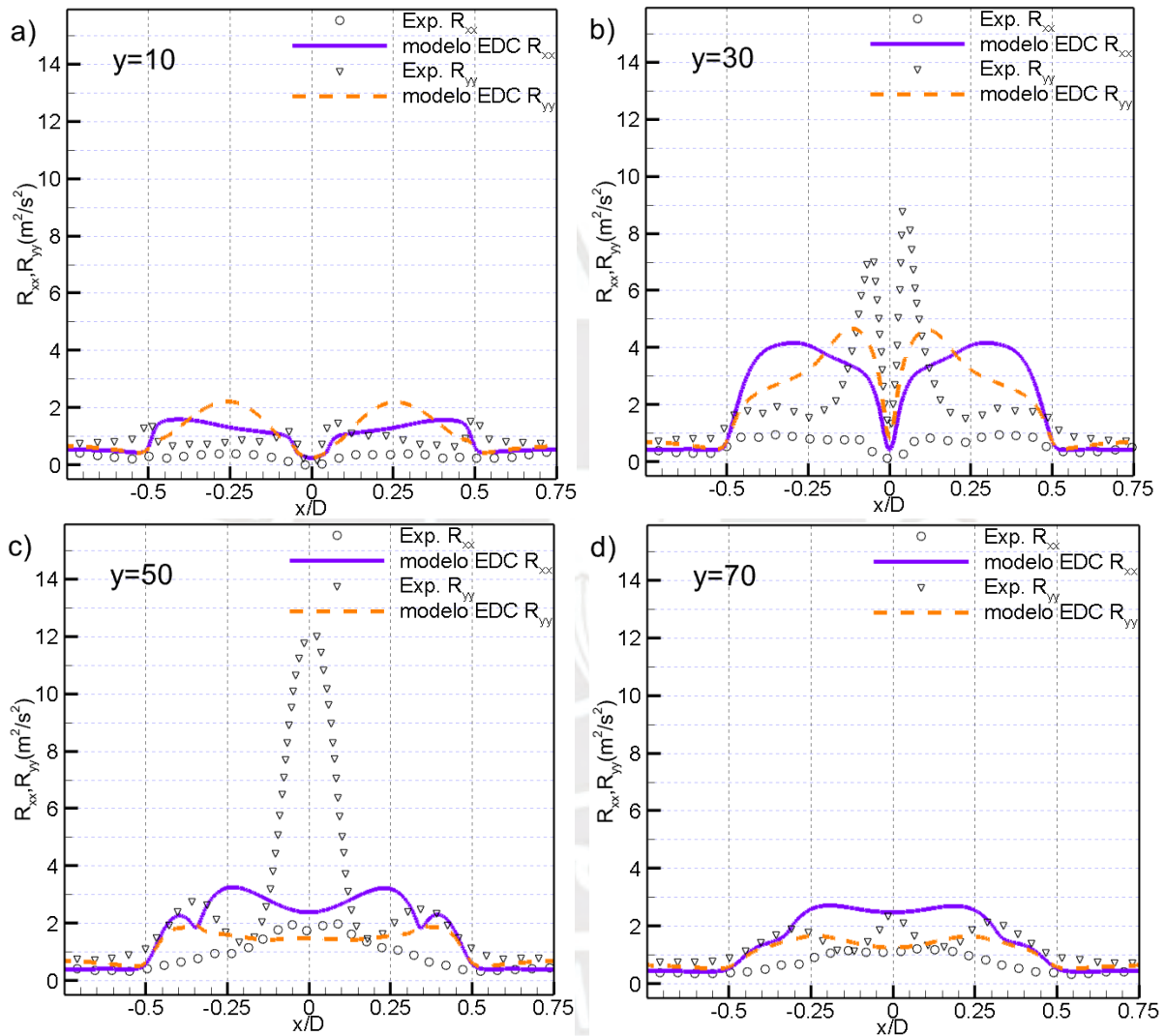


Figura 11. Perfiles de los tensores normales en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y 70 mm por encima del *bluff-body*.

3.4. Comparación de la especie química OH

El radical hidroxilo OH es una variable tomada en cuenta para evaluar el modelo de combustión EDC utilizado. El contorno de OH comparado con el experimental es mostrado en la Figura 12. Ciertos parecidos con el experimento son observados; por ejemplo; el ancho y la

forma del contorno son semejantes al experimento Sin embargo, de acuerdo a los resultados numéricos no existe una cantidad a considerar de OH hasta la posición $y = 40 \text{ mm}$; sin embargo, el experimento indica que si existe formación de OH en posiciones axiales inferiores a 40 mm .

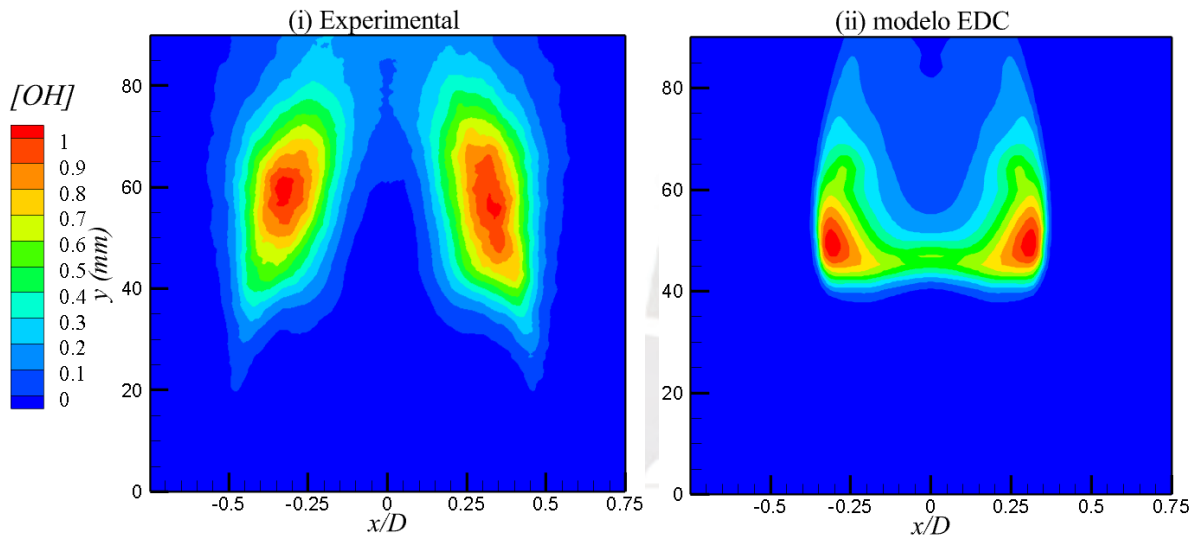


Figura 12. Contornos de OH i) experimental y ii) numérico.

La comparación de los perfiles de OH en cuatro posiciones axiales fijas para un mejor análisis son mostradas en la Figura 13. Para $y = 10 \text{ mm}$ las cantidades de OH son cero y guarda relación con el experimento que indica que en esta posición la cantidad de OH es casi despreciable. En la posición $y = 30 \text{ mm}$, el valor de OH obtenido continua siendo cero, sin embargo, para esta posición los datos experimentales indican que si existe una cantidad a considerar de OH. Para la posición $y = 50 \text{ mm}$ si existe una cantidad comparable con el experimento. De acuerdo al experimento en la zona central $x/D = 0$ la cantidad de OH formado es cero debido a que no existe reacción ya que solo está presente el flujo de combustible que aún no ha alcanzado el punto de estancamiento. Sin embargo, en los resultados obtenidos indican una cantidad de OH formado considerable, cuyo valor es la mitad del valor máximo. En la zona de recirculación valores máximos bastante cercanos al experimental son obtenidos. Para $y = 70 \text{ mm}$ la cantidad de OH obtenida es menor que el experimento en la

zona de recirculación y coincide con el experimento en $x/D = 0$. Tanto en la posición $y = 50 \text{ mm}$ y $y = 70 \text{ mm}$ los perfiles de OH comienzan a subir indicando la presencia de OH a partir de la posición radial $x/D = 0.35$, pero en el experimento esto comienza a ocurrir en la posición radial $x/D = 0.6$. Esto es debido a que la zona de recirculación obtenida es menos ancha que el mostrado en el experimento.

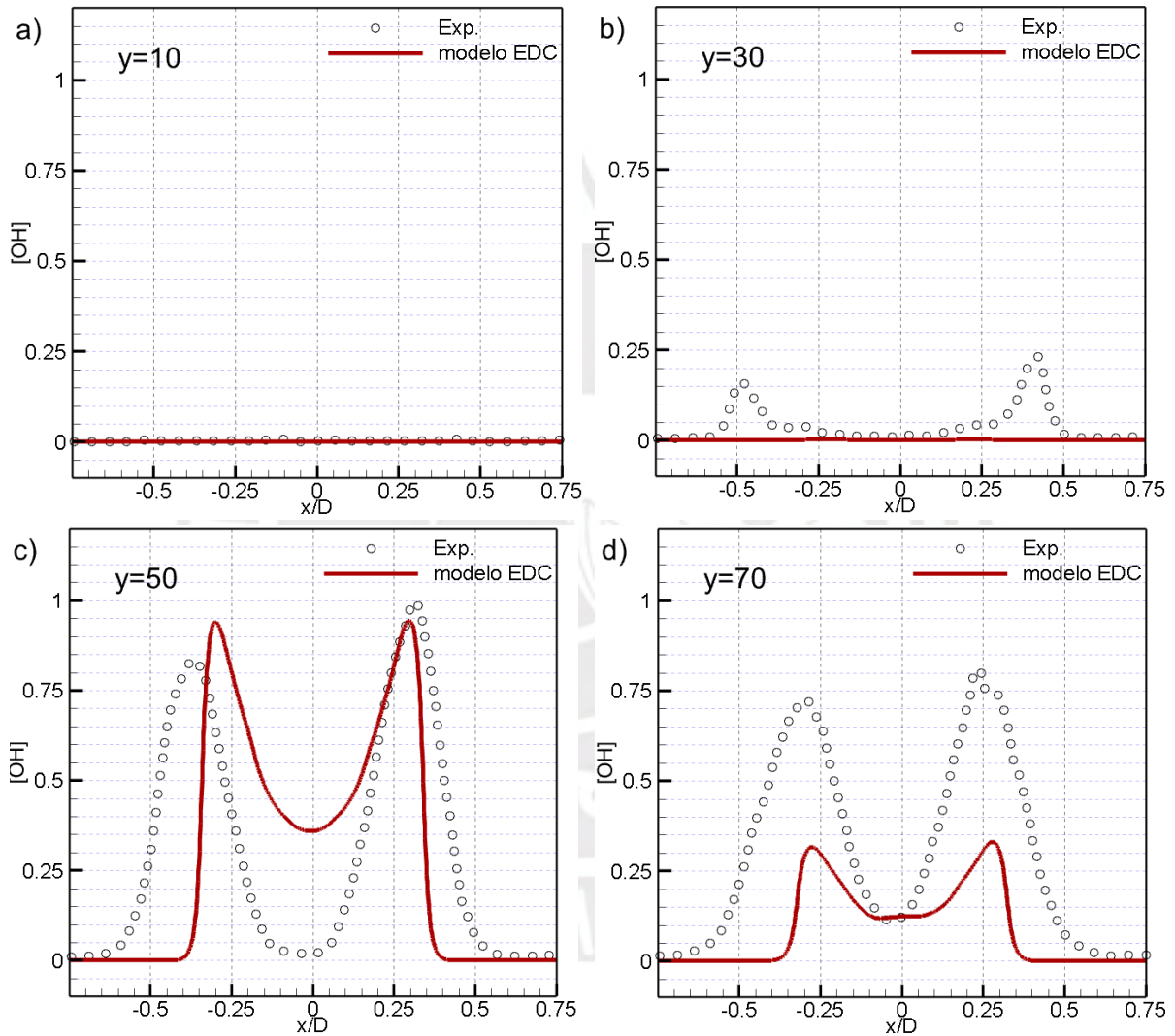


Figura 13. Contornos de OH y perfiles de OH en posiciones axiales fijas de 10, 30, 50 y

70 mm por encima del *bluff-body*.

Conclusiones

El modelo de turbulencia SST k - ω disponible en OpenFOAM cuando es utilizado en conjunto con el modelo de combustión EDC permite predecir de manera aceptable el comportamiento del flujo turbulento reactivo en un quemador tipo *bluff-body*. Este modelo de turbulencia logra describir de mejor manera el comportamiento de flujo cerca de las paredes. Esto permite describir mejor el comportamiento del flujo de combustible en el ducto del inyector logrando tener una velocidad de salida del jet del combustible lo más cercano posible al experimento. Por un lado, los resultados obtenidos de la velocidad axial y radial guardan buena relación en la zona de recirculación, mientras que los valores obtenidos de energía cinética turbulenta k y los tensores de Reynolds son mayores a los experimentales. Por otro lado, en la línea de centro axial la componente axial de la velocidad obtenida presenta un punto de estancamiento con un valor menor y en una posición más cercana al *bluff-body* que el experimento, asimismo en consecuencia, la posición de los valores máximos de la energía cinética turbulenta y los tensores normales obtenidos presentan el mismo comportamiento.

El modelo de combustión EDC logra predecir la especie química OH y en ciertas posiciones axiales como $y = 50 \text{ mm}$ o $y = 70 \text{ mm}$ guarda una relación muy cercana con el experimento. Es importante mencionar que la formación de OH es difícil de predecir en flujos turbulentos reactivos debido a la cinética química lenta de esta especie química. Hay zonas de OH que no aparecen en los resultados numéricos, por ejemplo, en la posición $y = 30 \text{ mm}$. De acuerdo al modelo EDC la combustión ocurre en las zonas de remolinos pequeños donde la energía cinética turbulenta es disipada. Por lo tanto, la combustión dependerá de lo bien que esté descrito estos remolinos pequeños en el flujo turbulento. Entonces una de las razones de las discrepancias observadas entre resultados numéricos y experimentales en la formación de OH es la descripción poco precisa de los campos de energía cinética turbulenta k y tensores de Reynolds. También hay que resaltar que el caso analizado no presenta niveles de turbulencia

excesivamente altos y el modelo EDC funciona de una mejor manera en flujos de alta turbulencia.

El tiempo computacional requerido para alcanzar una solución convergida es considerable. Esto ocurre debido a que el modelo EDC resuelve una ecuación de transporte para cada especie química considerada. Para reducir el referido tiempo computacional, el uso de mecanismos cinéticos reducidos es sugerido.



Bibliografia

- Bourdrel, T., Bind, M. A., Béjot, Y., Morel, O., & Argacha, J. F. (2017). Effets cardiovasculaires de la pollution de l'air. *Archives of Cardiovascular Diseases*, *110*(11), 634–642. <https://doi.org/10.1016/j.acvd.2017.05.003>
- Caetano, N. R., & Figueira da Silva, L. F. (2015). A comparative experimental study of turbulent non premixed flames stabilized by a bluff-body burner. *Experimental Thermal and Fluid Science*, *63*, 20–33. <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2015.01.006>
- Ghasemi, E., Soleimani, S., & Lin, C. X. (2014). RANS simulation of methane-air burner using local extinction approach within eddy dissipation concept by OpenFOAM. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, *54*, 96–102. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2014.03.006>
- Law, C. K. (2006). Combustion physics. In *Combustion Physics* (Vol. 9780521870). <https://doi.org/10.1017/CBO9780511754517>
- Li, Z., Malik, M. R., Cuoci, A., & Parente, A. (2017). Edcsmoke: A new combustion solver for stiff chemistry based on OpenFOAM®. *AIP Conference Proceedings*, *1863*. <https://doi.org/10.1063/1.4992364>
- Magnussen, B. B. F. (2005). The Eddy Dissipation Concept: A Bridge Between Science and Technology. *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion*, 1–25. http://folk.ntnu.no/ivarse/edc/BFM_ECOMAS2005_Lisboa.pdf
- OpenCFD, “OpenFOAM® - Official home of The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox.”. Disponible en: { HYPERLINK <https://www.openfoam.com/> }.
- Poinsot, T., & Veynante, D. (2012). *Theoretical and Numerical Combustion (3rd edition)*.

- Shiehnejadhesar, A., Mehrabian, R., Scharler, R., Goldin, G. M., & Obernberger, I. (2014). Development of a gas phase combustion model suitable for low and high turbulence conditions. *Fuel*, 126(2014), 177–187. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.02.040>
- Smith, G., Golden, D., Frenklach, M., Moriarty, N., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C., Hanson, R., Song, S., Gardiner, W., Lissianski, V., and Qin, Z., What's New in GRI-Mech 3.0. Disponible en: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>
- Versteeg, H.K. and Malalasekera, W. (2007). An Introduction to Computational Fluid Dynamics. In *Introduction to Computational Fluid Dynamics* (2do editio). <https://doi.org/10.1002/9781119369189>
- Wilcox, D. C. (1988). Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA Journal*, 26(11), 1299–1310. <https://doi.org/10.2514/3.10041>

