

**PONTIFICIA UNIVERSIDAD
CATÓLICA DEL PERÚ**

Escuela de Posgrado



Desarrollo de modelos de formación de hollín
para la identificación vía modelamiento numérico
de las principales especies químicas
precursoras de hollín en flujos turbulentos
reactivos

Tesis para obtener el grado académico de Magíster en Energía que
presenta:

René Sebastian Valencia Ramírez

Asesor:

Dr. César Celis Perez

Co-asesor:

Prof. Luis Fernando Figueira da Silva

Lima, 2023


Informe de Similitud

Yo, César Celis Pérez, docente de la Escuela de Posgrado de la Pontificia Universidad Católica del Perú, asesor de la tesis titulada “Desarrollo de modelos de formación de hollín para la identificación vía modelamiento numérico de las principales especies químicas precursoras de hollín en flujos turbulentos Reactivos”, del autor René Sebastian Valencia Ramírez, dejo constancia de lo siguiente:

- El mencionado documento tiene un índice de puntuación de similitud de 11%. Así lo consigna el reporte de similitud emitido por el software *Turnitin* el 23/01/2023.
- He revisado con detalle dicho reporte y la Tesis y no se advierte indicios de plagio.
- Las citas a otros autores y sus respectivas referencias cumplen con las pautas académicas.

Lugar y fecha:

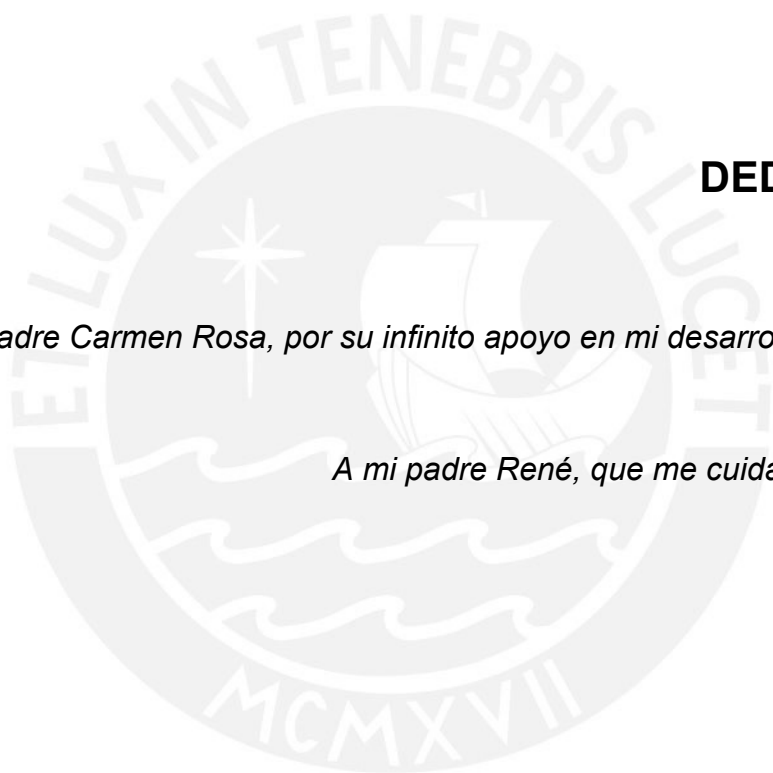
Lima, 23 de enero de 2023.

Apellidos y nombres del asesor: Celis Pérez, César	
DNI: 10861649	Firma 
ORCID: 0000-0003-4478-0611	

RESUMEN

El modelamiento numérico de procesos de formación de hollín en sistemas de combustión reales representa un gran reto debido a la fuerte interacción entre la turbulencia, la cinética química y la dinámica de las partículas de hollín. Esto significa que tanto los modelos de turbulencia como los de reacción química deben ser lo suficientemente detallados como para producir resultados precisos de las distintas especies químicas que intervienen en los procesos de formación de hollín. También es importante que todas las fases de la formación de hollín sean descritas adecuadamente por los modelos numéricos utilizados, y que exista una herramienta computacional capaz de modelar dichos fenómenos. Sin embargo, en la actualidad no existe ninguna herramienta de libre acceso que incluya algún tipo de modelamiento detallado de hollín, por lo que la mayoría de los estudios sobre el tema han sido realizados en el pasado con herramientas desarrolladas por los propios investigadores. En consecuencia, en este trabajo, utilizando C++ como lenguaje de programación, diferentes modelos detallados de formación de hollín han sido implementados en la herramienta computacional de acceso libre OpenFOAM. Más específicamente, los modelos considerados incluyeron (i) el modelo semi-empírico de 2 ecuaciones (2EQ), y los modelos basados en (ii) el método de momentos con cierre interpolativo (MOMIC), (iii) el método híbrido de momentos (HMOM), y (iv) el método seccional discreto (DSM). Todos los modelos fueron desarrollados y evaluados en los contextos de simulación *Reynolds averaged Navier Stokes* (RANS) y *large eddy simulation* (LES). Además, la fase gaseosa del proceso de combustión fue descrita usando el modelo *steady laminar flamelet* (SLF), en las simulaciones RANS, y el modelo *flamelet/progress variable* (FPV), en las simulaciones LES. Las simulaciones numéricas fueron realizadas considerando diferentes especies químicas precursoras de hollín en la fase de nucleación de este. Para la oxidación del hollín, especies oxidantes como el radical hidroxilo (OH) y el oxígeno (O_2) fueron consideradas. Para el crecimiento superficial, a su vez, el acetileno (C_2H_2) y distintos hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAH) fueron considerados. Los

diferentes resultados numéricos obtenidos en contextos RANS y LES fueron comparados con los correspondientes datos experimentales del International Sooting Flame Workshop (ISF), correspondiente a las llamas turbulentas (i) *Adelaide jet flame* EHN 1 y (ii) *Adeladie bluff-body flame* ENB-1. En concreto, los niveles de hollín predichos con cada uno de los modelos de formación de hollín considerados fueron evaluados y comparados con datos experimentales disponibles en la literatura. Los principales resultados obtenidos indican que, utilizando como especies químicas precursoras al benceno (A1) (en el caso RANS) y al pireno (A4) (en el caso LES), el mejor modelo para predecir la formación de hollín en las llamas turbulentas estudiadas es el HMOM. En particular, este modelo es capaz de captar la bimodalidad de la función de distribución del tamaño del hollín y de incluir las cadenas de agregados. También fue comprobado que los principales precursores del hollín son los PAH, y que el campo medio de estos no varía significativamente de uno a otro. Por lo tanto, utilizando un adecuado factor de adherencia, la importancia del PAH particular utilizado en la nucleación disminuye. Finalmente, los resultados indicaron también que el costo computacional asociado a cada modelo es un factor limitante. Así, el elevado costo computacional del modelo DSM no justifica su uso en llamas turbulentas. De esta forma, en términos de costo computacional, la mejor opción para las llamas estudiadas es también el modelo HMOM.



DEDICATORIA

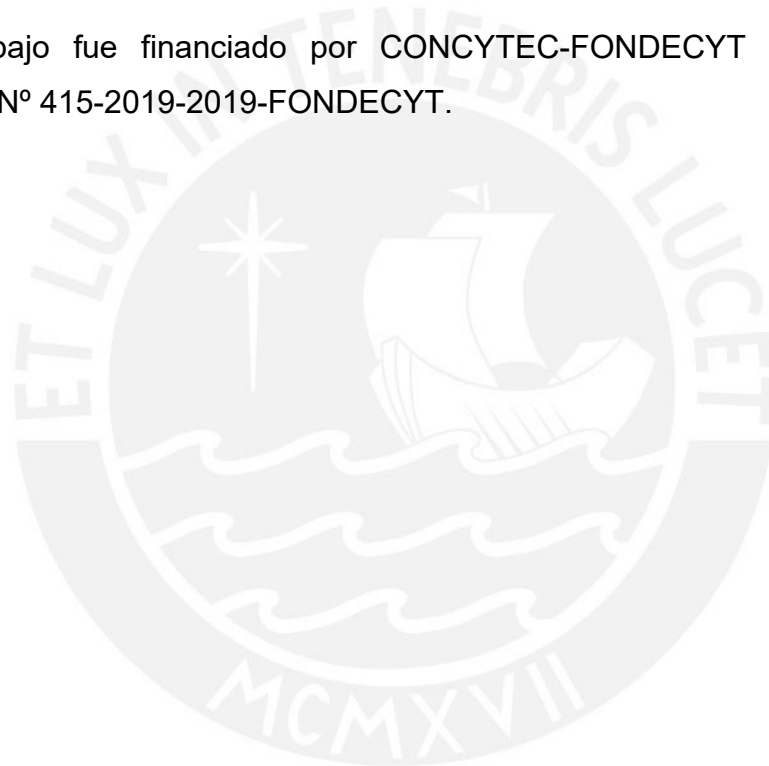
A mi madre Carmen Rosa, por su infinito apoyo en mi desarrollo académico y personal.

A mi padre René, que me cuida desde el cielo.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, quiero dar gracias a mi asesor, el Dr. César Celis, por su incalculable apoyo y asesoramiento durante estos 3 años. También me gustaría dar las gracias a mi co-asesor, el Prof. Luis Fernando Figueira da Silva, por las valiosas enseñanzas y sugerencias durante el proyecto. Gracias a los dos por ser exigentes conmigo y por impulsarme a superar cualquier barrera.

Este trabajo fue financiado por CONCYTEC-FONDECYT (PROCIENCIA), Contrato N° 415-2019-2019-FONDECYT.



ÍNDICE DE CONTENIDOS

RESUMEN	ii
DEDICATORIA	iv
AGRADECIMIENTOS	v
INTRODUCCIÓN	17
ANTECEDENTES	17
OBJETIVOS	22
METODOLOGIA	23
ALCANCE	25
DESCRIPCIÓN DE LA TESIS	26
Capítulo 1 ESTADO DEL ARTE	27
1.1. MORFOLOGIA Y ESTRUCTURA DEL HOLLÍN	27
1.2. MECANISMOS DE FORMACIÓN DEL HOLLÍN	28
1.3. MODELAMIENTO DE LA FASE GASEOSA DEL HOLLÍN	32
Capítulo 2 MODELAMIENTO MATEMÁTICO	35
2.1. ECUACIONES GOVERNANTES	35
2.2. MODELAMIENTO DE LA TURBULENCIA	36
2.2.1. RANS	38
2.2.2. LES	40
2.3. MODELOS DE COMBUSTIÓN	43
2.3.1. Steady laminar flamelet (SLF)	43
2.3.2. Flamelet progress variable (FPV)	45

2.4.	MODELO DE RADIACIÓN	47
2.5.	MODELOS DE FORMACIÓN DE HOLLÍN	48
Capítulo 3 MODELAMIENTO DE HOLLÍN		50
3.1.	DINÁMICA DE AEROSOLES	50
3.2.	MODELO SEMI EMPÍRICO.....	51
3.3.	MÉTODO DE MOMENTOS CON CIERRE INTERPOLATIVO (MOMIC)	53
3.3.1.	Nucleación	55
3.3.2.	Coagulación.....	55
3.3.3.	Crecimiento superficial y Oxidación.....	57
3.4.	MÉTODO HÍBRIDO DE MOMENTOS (HMOM)	59
3.4.1.	Nucleación	62
3.4.2.	Condensación de PAH.....	63
3.4.3.	Coagulación.....	64
3.4.4.	Crecimiento superficial.....	66
3.4.5.	Oxidación	67
3.5.	MÉTODO SECCIONAL DISCRETO (DSM)	68
3.5.1.	Nucleación	70
3.5.2.	Coagulación.....	71
3.5.3.	Crecimiento superficial y Oxidación.....	72
3.5.4.	Dinámica interseccional	73
Capítulo 4 MODELAMIENTO NUMÉRICO		75
4.1.	HERRAMIENTA COMPUTACIONAL.....	75
4.1.1.	Estructura de solvers	76

4.1.2.	High level language	79
4.1.3.	Manipulación de datos en OpenFOAM	80
4.1.4.	Solvers de combustión	82
4.1.4.1.	FlameletSimpleFoam	82
4.1.4.2.	FPVFoam	85
4.1.5.	Implementación de modelos de hollin	88
4.1.5.1.	Implementación del modelo de 2 ecuaciones	89
4.1.5.2.	Implementación del modelo MOMIC	91
4.1.5.3.	Implementación del modelo HMOM	93
4.1.5.4.	Implementación del modelo DSM	95
4.1.6.	Esquemas numéricos y solvers lineares	97
4.1.6.1.	fvSchemes	97
4.1.6.2.	fvSolution	99
4.2.	CONFIGURACIONES GEOMÉTRICAS	100
4.2.1.	Adelaide jet flame 1 (EHN 1)	101
4.2.2.	Adelaide bluff-body flame 1 (ENB-1)	102
4.3.	GENERACIÓN DE MALLA	104
4.3.1.	Malla RANS	104
4.3.2.	Malla LES	106
4.4.	CONDICIONES DE CONTORNO E INICIALES	109
4.4.1.	Caso RANS	109
4.4.2.	Caso LES	111
Capítulo 5 RESULTADOS Y DISCUSIONES		115

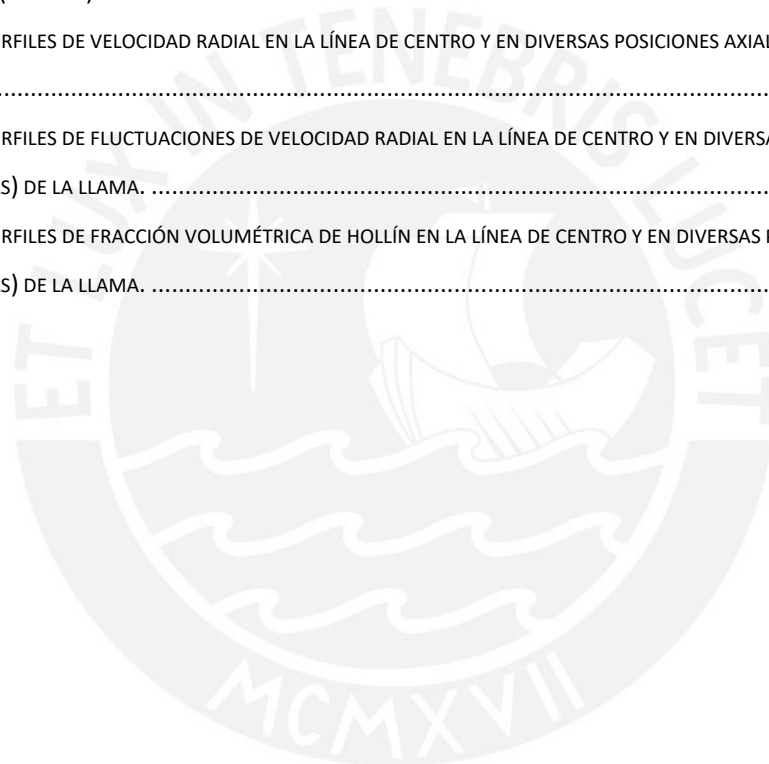
5.1. CONTEXTO RANS	115
5.1.1. Generación de flamelets.....	115
5.1.2. Estudio de independencia de malla	117
5.1.3. Campos de temperatura y fracción volumétrica de hollín	118
5.1.4. Perfiles de temperatura y fracción volumétrica de hollín.....	122
5.1.5. Efecto de la radiación	124
5.1.6. Análisis paramétrico.....	126
5.2. CONTEXTO LES.....	127
5.2.1. Generación de Flamelets	128
5.2.2. Estudio de calidad de malla	129
5.2.3. Campos de velocidad, tensores de Reynolds y temperatura	134
5.2.4. Campos de fracción másica de especies	138
5.2.5. Campos de fracción volumétrica de hollín	141
5.2.6. Perfiles de velocidad y fluctuaciones de velocidad.....	144
5.2.7. Perfiles de fracción volumétrica de hollín	149
5.2.8. Costo computacional.....	152
CONCLUSIONES	154
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	157
APÉNDICES	168

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1. PROPORCIÓN DE ENERGÍA PRIMARIA PROCEDENTE DE COMBUSTIBLES FÓSILES (OUR WORLD IN DATA, 2022).	18
FIGURA 2. EVOLUCIÓN DE LAS NORMAS EUROPEAS SOBRE EMISIONES DE MATERIAL PARTICULADO (BOUANICHE ET AL., 2019).....	19
FIGURA 3. CLASIFICACIÓN DE LOS MODELOS DE HOLLÍN.....	21
FIGURA 4. MEDIDA DEL TAMAÑO DE LAS PARTÍCULAS PRIMARIAS DE HOLLÍN DE UN SOLO AGLOMERADO (DAVIS ET AL., 2019).....	27
FIGURA 5. IMÁGENES DE MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN (TEM) DE AGLOMERADOS DE HOLLÍN (RIGOPOULOS, 2019).....	28
FIGURA 6. LOS PROCESOS FÍSICOS Y QUÍMICOS DE LA FORMACIÓN DEL HOLLÍN (THOMSON & MITRA, 2018).....	29
FIGURA 7. ESQUEMA DE LOS FENÓMENOS FISCOQUÍMICOS DE LA FORMACIÓN DEL HOLLÍN (MALDONADO COLMÁN ET AL., 2022).	30
FIGURA 8. REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DE LOS FENÓMENOS DE COALESCENCIA Y AGREGACIÓN DE HOLLÍN (MUELLER, 2019).	32
FIGURA 9. NÚMERO DE ESPECIES Y REACCIONES QUÍMICAS INCLUIDO EN DIFERENTES MECANISMOS CINÉTICOS (CURRAN, 2019).	33
FIGURA 10. CASCADA DE ENERGÍA EN FLUJOS TURBULENTOS EN FUNCIÓN DEL ESPECTRO DE ENERGÍA (R. MAHMOUD, 2020).	37
FIGURA 11. COMPARACIÓN DE VELOCIDADES INSTANTÁNEAS PARA UN JET TURBULENTO USANDO RANS, LES, DNS (RODRIGUEZ, 2019)	38
FIGURA 12. TEMPERATURA ESTEQUIOMÉTRICA EN FUNCIÓN DE LA TASA DE DISIPACIÓN ESCALAR ESTEQUIOMÉTRICA (PITSCH & IHME, 2005).....	46
FIGURA 13. FUNCIÓN DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS DE HOLLÍN PARA EL MÉTODO DE 2 ECUACIONES (MUELLER, 2019)	51
FIGURA 14. FUNCIÓN DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS DE HOLLÍN PARA EL MÉTODO MOMIC (MUELLER, 2019)	54
FIGURA 15. FUNCIÓN DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS DE HOLLÍN PARA EL MÉTODO HMOM (MUELLER, 2019).....	60
FIGURA 16. FUNCIÓN DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS HOLLÍN PARA EL MÉTODO DSM (M. MUELLER, 2019).	68
FIGURA 17. ESTRUCTURA GENERAL DE OPENFOAM (CFD DIRECT, 2022)	76
FIGURA 18. ESTRUCTURA DE UN SOLVER EN OPENFOAM (CFD DIRECT, 2022).....	77
FIGURA 19. ESQUEMA DE COMPILACIÓN DE SOLVERS EN OPENFOAM (CFD DIRECT, 2022).	79
FIGURA 20. DIAGRAMA DE FLUJO DEL SOLVER <i>FPVFOAM</i> (MANRIQUE ET AL., 2021).....	85
FIGURA 21. A) SECCIÓN CÓNICA DEL QUEMADOR DE TUBO. B) FOTOGRAFÍAS DE LA LLAMA JET EHN 1 (MAHMOUD, 2020).	102
FIGURA 22. A) VISTA SUPERIOR DEL QUEMADOR BLUFF-BODY. B) VISTA LATERAL DEL QUEMADOR BLUFF-BODY. C) FOTOGRAFÍAS DE LA LLAMA BLUFF-BODY ENB-1 (ROWHANI ET AL., 2021).....	103

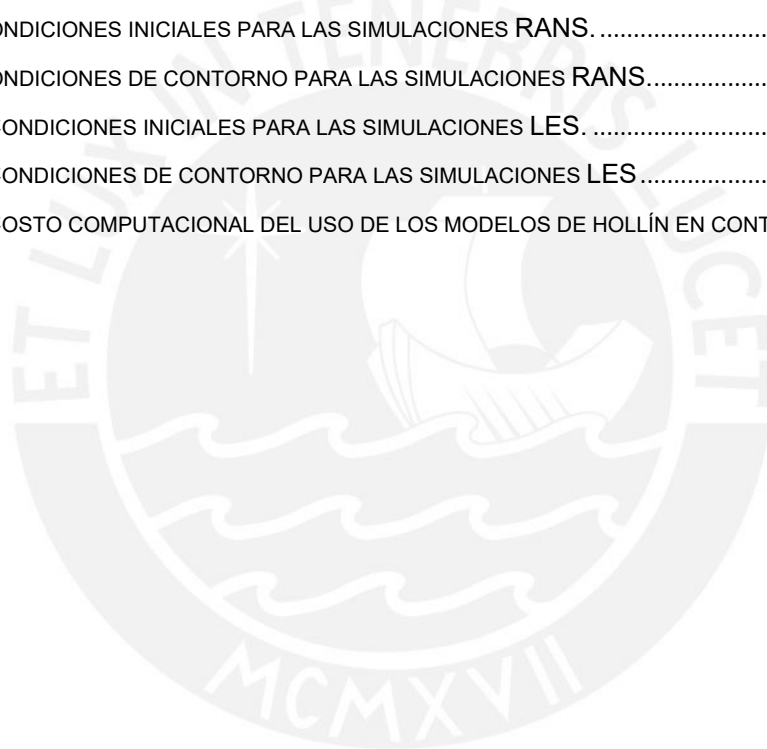
FIGURA 23. GEOMETRÍA AXI-SIMÉTRICA UTILIZANDO EL TIPO DE PARCHE WEDGE EN OPENFOAM (CFD DIRECT, 2022)..	104
FIGURA 24. GEOMETRÍA AXI-SIMÉTRICA UTILIZANDO EL TIPO DE PARCHE WEDGE EN OPENFOAM (CFD DIRECT, 2022)..	105
FIGURA 25. MALLADO USANDO SNAPPYHexMESH (CFD DIRECT, 2022).	106
FIGURA 26. GEOMETRÍA DE SUPERFICIE TIPO BLUFF-BODY EN FORMATO STL.....	107
FIGURA 27. MALLA COMPUTACIONAL GENERADA UTILIZANDO <i>SNAPPYHexMESH</i>	108
FIGURA 28. REPRESENTACIÓN DE LOS REMOLINOS SINTÉTICOS CONVECTADOS CON EL MÉTODO DFSEM A TRAVÉS DE UN PLANO DE ENTRADA (POLETTO ET AL., 2013).	114
FIGURA 29. LIBRERÍA DE FLAMELETS DE T Y FRACCIÓN MÁSCICA DE C_2H_2 , OH Y C_6H_6 COMO FUNCIÓN DE LA TASA DE DISIPACIÓN ESCALAR ESTEQUIOMÉTRICA	116
FIGURA 30. LIBRERÍA DE FLAMELETS DE T Y FRACCIÓN MÁSCICA DE C_2H_2 , OH Y C_6H_6 COMO FUNCIÓN DE LA FRACCIÓN DE MEZCLA.....	117
FIGURA 31. PERFILES AXIALES DE FRACCIONES MÁSCICAS DE C_2H_2 , OH , C_6H_6 Y O_2 .	118
FIGURA 32. CONTORNOS DE TEMPERATURA OBTENIDOS CON LOS MÉTODOS: 2-ECUACIONES, MOMIC, HMOM Y DSM	119
FIGURA 33. CONTORNOS DE FRACCIÓN MÁSCICA DE OH , O_2 , C_2H_2 Y C_6H_6 OBTENIDOS CON EL MÉTODO HMOM	120
FIGURA 34. CONTORNOS DE FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN OBTENIDOS CON LOS MÉTODOS: 2-ECUACIONES, MOMIC, HMOM Y DSM.....	122
FIGURA 35. PERFILES DE FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN Y TEMPERATURA A LO LARGO DE LA LÍNEA DE CENTRO DE LA LLAMA.	123
FIGURA 36. PERFILES RADIALES DE FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN EN DIFERENTES POSICIONES AXIALES (ALTURAS) DE LA LLAMA	124
FIGURA 37. EFECTO DE LA RADIACIÓN EN LA FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN Y TEMPERATURA A LO LARGO DE LA LÍNEA DE CENTRO DE LA LLAMA.	126
FIGURA 38. ESTUDIO PARAMÉTRICO REALIZADO AL MÉTODO MOMIC.....	127
FIGURA 39. LIBRERÍA DE FLAMELETS DE T Y FRACCIÓN MÁSCICA DE C_2H_2 , OH , A1 (C_6H_6) Y A4 ($C_{16}H_{10}$) COMO FUNCIÓN DE LA TASA ESTEQUIOMÉTRICA DE DISIPACIÓN ESCALAR.....	129
FIGURA 40. A) PERFIL DE VELOCIDAD $u +$ EN LA CAPA LÍMITE EN FUNCIÓN DE $y +$. B) PERFIL DE VELOCIDAD $u +$ EN FUNCIÓN DE LA DISTANCIA A LA PARED. C) FLUCTUACIONES DE VELOCIDAD $u +$ EN FUNCIÓN DE $y +$	131
FIGURA 41. PERFILES AXIALES A LO LARGO DE LA LÍNEA DE CENTRO (LADO IZQUIERDO) Y RADIALES EN DIFERENTES POSICIONES AXIALES (LADO DERECHO) DE LAS VELOCIDADES U_z Y U_r EN M/s.	132
FIGURA 42. PERFILES AXIALES A LO LARGO DE LA LÍNEA DE CENTRO (LADO IZQUIERDO) Y RADIALES EN DIFERENTES POSICIONES AXIALES (LADO DERECHO) DE LAS FLUCTUACIONES DE VELOCIDAD U_z Y U_r EN M/s.	134
FIGURA 43. CAMPOS INSTANTÁNEO Y MEDIO DE VELOCIDAD AXIAL EN M/s.	135
FIGURA 44. CAMPOS INSTANTÁNEO Y MEDIO DE VELOCIDAD RADIAL EN M/s.	136
FIGURA 45. CAMPOS MEDIOS DE TENSORES DE REYNOLDS ZZ, RR Y RZ.	137
FIGURA 46. CAMPOS INSTANTÁNEO Y MEDIO DE TEMPERATURA EN K.	138
FIGURA 47. CAMPOS MEDIOS DE FRACCIONES MÁSCICAS DE C_2H_2 , O_2 Y OH	140

FIGURA 48. CAMPOS MEDIOS DE FRACCIONES MÁSICAS DE PAH: A1, A2, A3 Y A4.	141
FIGURA 49. CAMPOS INSTANTÁNEOS DE FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN OBTENIDOS CON LOS MODELOS DE 2 ECUACIONES, MOMIC, HMOM Y DSM.	143
FIGURA 50. CAMPOS MEDIOS DE FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN OBTENIDOS CON LOS MODELOS DE 2 ECUACIONES, MOMIC, HMOM Y DSM.....	144
FIGURA 51. PERFILES DE VELOCIDAD AXIAL EN M/S SOBRE LA LÍNEA DE CENTRO Y EN DIVERSAS POSICIONES AXIALES (ALTURAS) DE LA LLAMA.	145
FIGURA 52. PERFILES DE FLUCTUACIONES DE VELOCIDAD AXIAL EN M/S SOBRE LA LÍNEA DE CENTRO Y EN DIVERSAS POSICIONES AXIALES (ALTURAS) DE LA LLAMA.	147
FIGURA 53. PERFILES DE VELOCIDAD RADIAL EN LA LÍNEA DE CENTRO Y EN DIVERSAS POSICIONES AXIALES (ALTURAS) DE LA LLAMA.	148
FIGURA 54. PERFILES DE FLUCTUACIONES DE VELOCIDAD RADIAL EN LA LÍNEA DE CENTRO Y EN DIVERSAS POSICIONES AXIALES (ALTURAS) DE LA LLAMA.	149
FIGURA 55. PERFILES DE FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE HOLLÍN EN LA LÍNEA DE CENTRO Y EN DIVERSAS POSICIONES AXIALES (ALTURAS) DE LA LLAMA.	151



INDICE DE TABLAS

TABLA 1. COEFICIENTES DE EXTINCIÓN PARA H_2O , CO_2 , CO , CH_4 (BARLOW ET AL., 2001).	48
TABLA 2. PARÁMETROS DE LA TASA DE ARRHENIUS PARA EL MODELO MOMIC (APPEL ET AL., 2000). 58	
TABLA 3. PARÁMETROS DE LA TASA DE ARRHENIUS PARA EL MODELO HMOM (BLANQUART & PITSCH, 2009).	67
TABLA 4. OPERADORES DIFERENCIALES DE LAS CLASES FVM Y FVC.	80
TABLA 5. CLASES PREDEFINIDAS PARA TENSORES DE RANGO 0 A 2.	81
TABLA 6. UNIDADES DIMENSIONALES EN OPENFOAM	81
TABLA 7. ESQUEMAS NUMÉRICOS UTILIZADOS PARA LAS SIMULACIONES RANS Y LES.....	97
TABLA 8. CONDICIONES INICIALES PARA LAS SIMULACIONES RANS.	109
TABLA 9. CONDICIONES DE CONTORNO PARA LAS SIMULACIONES RANS.....	111
TABLA 10. CONDICIONES INICIALES PARA LAS SIMULACIONES LES.	112
TABLA 11. CONDICIONES DE CONTORNO PARA LAS SIMULACIONES LES.....	113
TABLA 12. COSTO COMPUTACIONAL DEL USO DE LOS MODELOS DE HOLLÍN EN CONTEXTOS LES.....	153



LISTA DE SIMBOLOS

VARIABLES

$\dot{Q}_{s,i}$	Tasa de producción de fracción de masa de hollín
$\dot{q}_{s,i}$	Densidad de fracción volumétrica de hollín
f_v	Fracción volumétrica de hollín
C_a	Factor de mejoramiento de Van der Waals
C_i	Factor de corrección de deslizamiento de Cunningham
C_{oxid}	Factor empírico de escalamiento de tasa para para la oxidación
$C_{w,1}$	Factor empírico de escalamiento de tasa para para la oxidación por OH
$C_{w,2}$	Factor empírico de escalamiento de tasa para la oxidación por O ₂
C_α	Factor empírico de escalamiento de tasa para nucleación
C_β	Factor empírico escalamiento de tasa para la coagulación
C_γ	Factor empírico escalamiento de tasa para el crecimiento superficial
D_f	Dimensión característica fractal
L_p	Función de interpolación logarítmica de Lagrange
M_C	Masa molar del carbón
M_p	Masa molar de una particular incipiente de hollín
N_A	Número de Avogadro
N_p	Número de partículas primarias por agregado
b_{nuc}	Concentración de radicales de núcleos hollín normalizada
d_c	Diámetro de agregados
d_p	Diámetro de la partícula
d_{prim}	Diámetro de partículas primarias
k_B	Constante de Boltzmann
\bar{u}	Velocidad de gas
v_{C2}	Volumen equivalente del número de átomos de carbono de dos precursores de hollín y dos moléculas de acetileno
v_{MAX}	Volumen de la partícula más grande
v_{MIN}	Volumen de la partícula más pequeña
v_T	Velocidad termoforética
η_{coll}	Eficiencia de colisión
$T_{w,1}$	Temperatura de activación de oxidación por OH
$T_{w,2}$	Temperatura de activación de oxidación por O ₂

T_α	Temperatura de activación de nucleación
T_β	Temperatura de activación de coagulación
X	Fracción molar
λ	Recorrido libre medio del Gas
σ	Número de Prandtl
B	Tasa de nucleación
D	Coefficiente de difusión turbulenta
G	Tasa de cambio del volumen de partícula debido a procesos superficiales
Kn	Número de Knudsen
M	Concentración másica de hollín
N	Densidad numérica de hollín
P	Presión
R	Constante universal de los gases ideales
T	Temperatura
Y	Fracción másica
d	Diámetro de partícula
k	Orden de momento
n	Densidad de número de partículas por unidad de volumen de partícula
t	Tiempo
v	Volumen de partícula
β	Factor de frecuencia de colisión
μ	Viscosidad
ρ	Densidad de fase gaseosa

ABREVIACIONES

FPV	Flamelet/progress variable
HACA	Hydrogen-abstraction acetylene-addition
HMOM	Hybrid method of moments
LES	Large eddy simulation
MOM	Method of moments
MOMIC	Method of moments with interpolative closure
NDF	Number density function
OTA	Optically thin approximation

PAH	Polycyclic aromatic hydrocarbons
PBE	Population balance equation
PDF	Probability density function
PSDF	Particle size distribution function
QMOM	Quadrature method of moments
RANS	Reynolds-averaged Navier-Stokes
RTE	Radiative transfer equation
SLF	Steady laminar flamelet



INTRODUCCIÓN

ANTECEDENTES

La matriz energética mundial depende mayoritariamente de procesos de combustión. Más específicamente, combustibles fósiles han sido usados para cubrir en torno del 80% de la demanda total de energía durante décadas (Kleidon, 2019). En el Perú, estos combustibles representan la fuente del 83 % de la energía producida (MINEM, 2018). Esto hace que la combustión sea un proceso vital para la economía mundial, estando presente en diversas áreas de la actividad humana, como la industria minera, química, siderúrgica, de transporte, del cemento y del vidrio, entre otras. En la industria del petróleo y del gas natural, el proceso de combustión es principalmente el destino final de los hidrocarburos y también el medio utilizado para la generación de energía durante los procesos de extracción, transporte y refinamiento. Las industrias minera, química, siderúrgica, de cemento y vidrio destacan como los principales consumidores de los hidrocarburos y del gas natural en sus respectivos tratamientos de producción. La gran mayoría de los vehículos de motor, barcos y aviones utilizan la combustión de petróleo o gas natural en su funcionamiento. Además, la calefacción y la cocción de alimentos vía la quema de combustibles fósiles son muy importantes en los sectores comerciales y domésticos. La Figura 1 muestra que en la mayor parte del mundo la energía primaria depende de los combustibles fósiles.

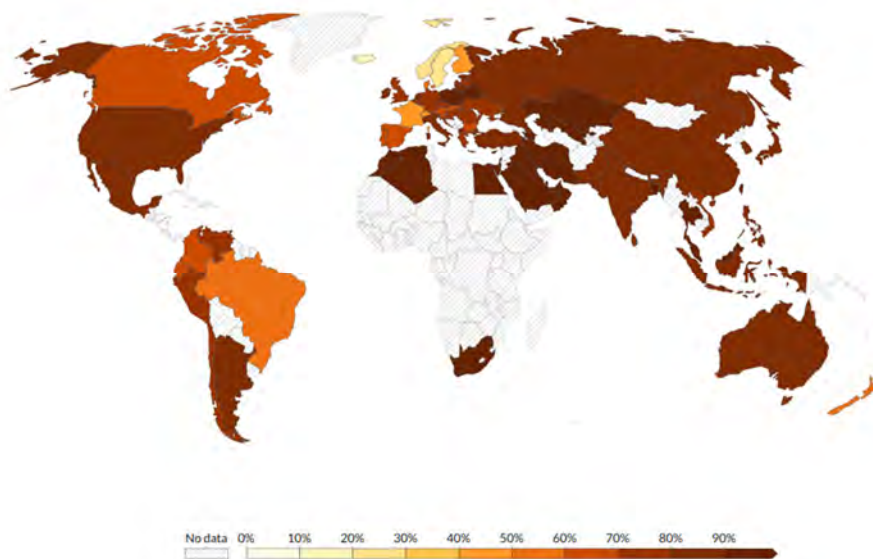


Figura 1. Proporción de energía primaria procedente de combustibles fósiles (Our World in Data, 2022).

Como es lógico, la combustión aporta múltiples beneficios, pero esta también trae consigo efectos adversos que hay que mitigar adecuadamente. Una de las principales inquietudes asociadas a los procesos de combustión está relacionada con la formación de subproductos, siendo los principales los hidrocarburos no quemados y parcialmente quemados, los óxidos de nitrógeno (NO_x), el monóxido de carbono (CO), los óxidos de azufre (SO_x) y el hollín. Estos agentes contaminantes suelen señalarse como los principales responsables de una serie de problemas específicos relacionados con la salud humana, la generación de lluvia ácida, el efecto invernadero y el calentamiento global, además de otros (Turns, 2000).

El hollín está compuesto principalmente por partículas carbonosas, pero hidrógeno y oxígeno también pueden estar presentes en su composición en pequeñas cantidades (Kennedy, 1997). La morfología del hollín incluye partículas y agregados que varían en tamaño desde escalas nanométricas hasta micrométricas (Rigopoulos, 2019). Ha sido comprobado que la exposición a estas partículas ultrafinas de hollín es perjudicial y responsable de enfermedades cardiovasculares y respiratorias. Estudios anteriores indican que algunos

precursores del hollín, como los hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAH), son cancerígenos (Baird et al., 2005). Además, las partículas de hollín tienen un impacto directo en la formación de nubes y también juegan un papel importante en el cambio climático (Wang, 2011). Los diversos inconvenientes asociados al hollín han llevado a la legislación a restringir su emisión. Por ejemplo, la Figura 2 muestra como las normativas europeas, con respecto a los materiales particulados, han ido tornándose cada vez más estrictas. Así, la norma EURO5 restringe las emisiones de hollín en un orden de 5 veces menor que la norma EURO4 (Hoerlle & Pereira, 2019). En el Perú, el Servicio Nacional de Meteorología e Hidrología del Perú (SENAMHI) reportó en 2018 que los niveles de hollín en la atmósfera del área metropolitana de Lima y Callao eran alarmantes, ya que superan los umbrales de protección definidos por la Organización Mundial de la Salud (OMS) (SENAMHI, 2018).

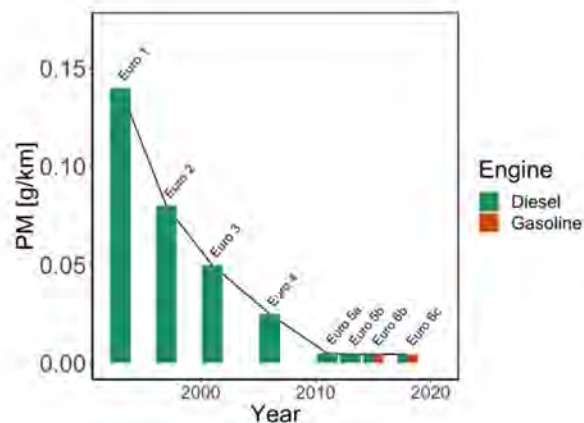


Figura 2. Evolución de las normas europeas sobre emisiones de material particulado (Bouaniche et al., 2019).

No todo es negativo con relación al hollín. Así, por ejemplo, en los procesos de combustión que tienen lugar en hornos industriales, debido a su naturaleza térmica radiante, el hollín es intencionalmente formado como forma de mejorar la transferencia de calor (Glassman & Yetter, 2008). También ha sido reconocida la importancia del hollín para el desarrollo de la síntesis de nanomateriales, como por ejemplo la producción de grafenos y de nanotubos de carbono (Wang, 2011). Por lo tanto, comprender y controlar la formación de partículas de hollín es

fundamental para el diseño de nuevos sistemas de combustión cada vez más eficientes, menos dañinos para los organismos vivos, y que permitan mitigar los problemas de contaminación ambiental derivados de la quema de combustibles fósiles.

A lo largo de los años importantes avances para comprender mejor la formación del hollín han sido realizados (D'Anna & Sirignano, 2019). Sin embargo, todavía hay muchos detalles desconocidos de este fenómeno, principalmente aquellos producidos durante la transición entre las especies químicas en fase gaseosa y la nucleación de las primeras partículas de hollín. Los datos experimentales permiten concluir que los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH) son los principales precursores de las partículas de hollín (Mercier et al., 2019), sin embargo todavía existe una laguna en el conocimiento sobre este tema.

Para lograr una buena caracterización del hollín, los modelos matemáticos deben tener en cuenta la interacción entre la turbulencia, la cinética química y la dinámica de las partículas de hollín, incluyendo todas las fases de formación de este (Appel et al., 2000). Por lo tanto, es necesario utilizar modelos detallados de turbulencia y reacción química, pues estos determinan los parámetros que caracterizan el flujo turbulento reactivo, los cuales representan los datos de entrada para los modelos de formación de hollín. Debido al gran número de partículas de hollín, del orden de ppm, el seguimiento de partículas individuales es un reto en el modelamiento (Yang & Mueller, 2019). Por lo tanto, descripciones estadísticas de la evolución de la población de partículas de hollín son a menudo utilizadas, lo que implica obtener estadísticamente la función de densidad de probabilidad (NDF) que describe la concentración de partículas de hollín en función del tamaño de este (Gallen et al., 2019). A grandes rasgos, los modelos de hollín son clasificados en tres subgrupos (i) modelos empíricos, (ii) semiempíricos y (iii) detallados. Los modelos detallados son los modelos que han sido más estudiados en los últimos años. Estos modelos incluyen el método de los momentos (MOM) (Frenklach, 2002b; Kazakov & Frenklach, 1998; M. Mueller et al., 2009b), el método seccional (Gelbard et al., 1980; Netzell et al., 2007) y el método estocástico de Monte Carlo (Balthasar & Kraft, 2003; Zhao et

al., 2005). De estos métodos, el método de los momentos y el método seccional son los más aplicados en flujos turbulentos reactivos. Esto ocurre debido al alto costo computacional del método de Monte Carlo, que lo hace inviable para casos turbulentos multidimensionales. La Figura 3 muestra la clasificación de los modelos de hollín.



Figura 3. Clasificación de los modelos de hollín.

En los últimos años, herramientas de dinámica de fluidos computacional (CFD) de código abierto como OpenFOAM (Weller et al., 1998) han sido empleadas en muchas investigaciones. Una breve revisión muestra que varios investigadores han implementado o desarrollado diferentes solvers de flujo reactivo en esta plataforma. Por ejemplo, en el solver edcSimpleFoam (Lilleberg et al., 2013), el modelo de combustión EDC (Eddy Dissipation Concept) fue utilizado. El código computacional OpenSMOKE (Cuoci, 2010) utiliza el concepto de flamelets para el modelamiento de llamas turbulentas no premezcladas. Además, también existe el OpenQBMM (Passalacqua et al., 2019) que es un conjunto de solvers implementado para resolver las ecuaciones de balance de población utilizando el método de momentos.

Por último, es importante señalar que actualmente no existe ningún solver de código abierto capaz de predecir con precisión el proceso complejo de formación de hollín. Además, entender y controlar la formación de partículas de hollín en

los procesos de combustión es de vital importancia. Por lo tanto, esta tesis desarrolla, utilizando OpenFOAM como plataforma de trabajo, modelos de formación de hollín capaces de identificar las principales especies químicas responsables de la formación de hollín en flujos turbulentos reactivos. En este trabajo, así, los parámetros que determinan el nivel de hollín formado en procesos de combustión turbulenta, presentes en casi todos los sistemas de combustión prácticos utilizados en la actualidad, son identificados. La correcta identificación de estos precursores del hollín permitirá proponer en el futuro diseños de sistemas de combustión más eficientes y con menor impacto sobre la salud y el medio ambiente. Los impactos de los resultados obtenidos a través del desarrollo de este trabajo son por tanto significativos, ya que benefician a toda la población y a la sociedad en general.

OBJETIVOS

Objetivo General

- Desarrollar modelos de formación de hollín para identificar, a través de modelamiento numérico, las principales especies químicas responsables por el nivel de hollín formado en flujos turbulentos reactivos.

Objetivos Específicos

- Determinar el estado del arte relativo al modelamiento numérico de la formación de hollín en procesos de combustión turbulenta.
- Formular matemáticamente modelos de formación hollín a ser implementados en herramienta computacional de código abierto.
- Implementar en herramienta computacional y validar usando datos disponibles en la literatura modelos de formación hollín aplicables en llamas turbulentas.
- Aplicar herramienta a características de configuraciones de quemadores tipo *jet-flame* y *bluff-body*.

METODOLOGIA

La metodología seguida para alcanzar los objetivos propuestos en este trabajo de investigación es presentada a continuación.

Revisión bibliográfica

La revisión bibliográfica fue continua a lo largo de todo este trabajo de investigación, aunque la mayor parte de esta revisión de conceptos fue efectuada durante los primeros meses del trabajo. Conceptos fundamentales de dinámica de fluidos computacional fueron inicialmente abordados, así como conceptos básicos de modelamiento de turbulencia, combustión y radiación. Una extensa revisión bibliográfica de la literatura relacionada al hollín fue particularmente realizada, incluyendo conceptos de formación de hollín, mecanismos cinéticos empleados y modelos matemáticos asociados. Asimismo, estudios anteriores disponibles en la literatura sobre formulación, implementación y uso de modelos de hollín en flujos turbulentos reactivos fueron revisados.

Desarrollo de un modelo simplificado de formación de hollín

Inicialmente, procesos de familiarización con el lenguaje de programación C++ y la herramienta de código abierto OpenFOAM fueron realizados. Luego, un modelo semi-empírico de formación de hollín, el modelo de 2 ecuaciones de (Brookes & Moss, 1999), fue implementado en OpenFOAM. Esta implementación fue verificada usando la herramienta computacional Ansys Fluent (ANSYS Inc., 2021), la cual incluye en su librería el mismo modelo de hollín implementado. Las simulaciones numéricas en ambas herramientas fueron realizadas usando un modelo de combustión basado en flamelets y una configuración 2D de una llama disponible en la literatura.

Formulación matemática de modelos detallados de formación de hollín

Durante esta etapa, la formulación matemática de modelos detallados de formación de hollín fue realizada. En particular, los principales enfoques para el modelamiento de hollín según el estado del arte fueron primeramente revisados y comparados. Los modelos de hollín estudiados en este trabajo, MOMIC (method of moments with interpolative closure), HMOM (hybrid method of moments), y DSM (discrete sectional method), fueron a seguir seleccionados en función de los requisitos del proyecto y la capacidad computacional disponible. Estos modelos seleccionados fueron a continuación formulados matemáticamente. En esta fase, los modelos de combustión, turbulencia y radiación utilizados en conjunto con los modelos de formación de hollín fueron también revisitados.

Implementación y validación de modelos detallados de formación de hollín

Las ecuaciones matemáticas formuladas anteriormente fueron implementadas en esta etapa en la herramienta computacional de código abierto OpenFOAM. En particular, un modelo de combustión útil en simulaciones numéricas tipo RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) basado en el concepto SLF (steady laminar flamelet) fue seleccionado, sobre el cual fueron implementados todos los modelos de hollín. Estas primeras simulaciones numéricas fueron realizadas utilizando una llama tipo jet 2D. Una vez implementados y ajustados todos los modelos de hollín, para determinar su influencia en los perfiles de fracción volumétrica de hollín, un estudio paramétrico de los principales parámetros presentes en las ecuaciones de los modelos de hollín fue realizado.

Identificación de precursores de hollín

Una vez desarrollados los modelos de formación de hollín, diferentes simulaciones numéricas de flujos turbulentos reactivos en un contexto LES (large eddy simulation) fueron realizadas. En estas simulaciones, un modelo de combustión basado en el concepto FPV (flamelet progress variable) fue utilizado, y perfiles de hollín usando diferentes precursores, concretamente acetileno y los del grupo de los hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAH), fueron determinados. Los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas fueron

comparados con resultados disponibles en la literatura. El diagrama de flujo con la metodología de las simulaciones es presentado en el Apéndice A.

ALCANCE

Este trabajo involucra el desarrollo, incluyendo formulación, implementación y uso, de 1 modelo semi-empírico y 3 modelos detallados de formación de hollín en la herramienta computacional de libre acceso OpenFOAM. El trabajo fue desarrollado en un contexto de flujos turbulentos reactivos, por lo que los parámetros empíricos de cada modelo de hollín fueron ajustados para este tipo de flujos. Para garantizar la fiabilidad de los resultados obtenidos, *solvers* de flujos reactivos desarrollados y utilizados por otros autores en diferentes publicaciones científicas fueron utilizados. Estos solvers involucran el uso de modelos de combustión tipo flamelet. Para las simulaciones en contextos RANS, configuraciones de flujo 2D y el solver *FlameletSimpleFoam* (Holzmann, 2012) fueron utilizados. A su vez, las simulaciones en contextos LES incluyeron el uso de configuraciones de flujo 3D y el solver *FPVFoam* (Xian, 2019). La selección de estos *solvers* fue debido a las limitaciones y a las ventajas de cada uno de ellos tanto para simulaciones RANS como LES. Para el caso RANS, ya que no fue posible obtener buenos perfiles de PAH de orden superior debido a las limitaciones del modelo de combustión, solamente acetileno y benceno fueron consideradas como especies precursoras del hollín. En LES, la especie precursora del hollín fue el Pireno (A4). El modelo de radiación utilizado es un modelo simplificado que no resuelve la ecuación de transporte de radiación. Debido a limitaciones en el solver LES, este modelo de radiación sólo fue usado en las simulaciones tipo RANS. Para el caso de la llama tipo *jet*, las comparaciones de los resultados numéricos obtenidos con aquellos disponibles en la literatura incluyeron perfiles de hollín solamente, mientras que para el caso de la llama tipo *bluff-body*, comparaciones de perfiles de velocidad y fluctuaciones de esta fueron también realizadas.

DESCRIPCIÓN DE LA TESIS

De acuerdo con la metodología y objetivos planteados, este manuscrito de tesis está organizado de la siguiente manera. En el Capítulo 1, algunos antecedentes sobre la química y la física de la formación del hollín son discutidos. En particular, los fenómenos del crecimiento de los PAH, la nucleación del hollín, el crecimiento superficial, la coagulación y la oxidación son abordados. Además, los avances más recientes en el modelamiento de hollín y la problemática actual que conlleva este modelamiento son resaltados en este capítulo. En el Capítulo 2, las ecuaciones gobernantes, así como los distintos enfoques y modelos utilizados, incluyendo los modelos de turbulencia, combustión y radiación, son presentados. En el Capítulo 3, la formulación matemática de los 4 modelos de hollín estudiados es descrita. El Capítulo 4 desarrolla el modelado numérico usado en este trabajo. Un hincapié particular es hecho en las herramientas de generación de malla utilizadas, así como en los generadores de turbulencia sintética, los esquemas numéricos y los aspectos a considerar en el modelamiento del hollín. También son indicadas las condiciones iniciales y de contorno para cada uno de los casos de estudio considerados. Adicionalmente, la implementación de los modelos de hollín en OpenFOAM es discutida, resaltando la jerarquía de clases, las librerías y los algoritmos necesarios empleados. Finalmente, en el Capítulo 5, los principales resultados numéricos obtenidos de las simulaciones RANS y LES son discutidos. El documento finaliza con las principales conclusiones del trabajo y la lista de referencias consultadas para el desarrollo de este.

Capítulo 1 ESTADO DEL ARTE

El estado del arte relativo al modelamiento numérico de la formación de hollín en procesos de combustión turbulenta es desarrollado en este capítulo. Más específicamente, la morfología y estructura del hollín es primeramente descrito. Así mismo, conceptos de mecanismos de formación y los desafíos que involucra el modelamiento en fase gaseosa son presentados.

1.1. MORFOLOGIA Y ESTRUCTURA DEL HOLLÍN

Las principales sustancias que componen el hollín son el Carbono (C) y el hidrógeno (H). Conforme el tamaño del hollín aumenta debido a los diferentes mecanismos de crecimiento, la proporción de C/H aumenta también (T. Zhang et al., 2019). El hollín es compuesto principalmente de partículas primarias que van normalmente hasta los 80 nm de tamaño, y de agregados o aglomerados de estas partículas que van desde los varios cientos de nm hasta unos pocos μm (Rigopoulos, 2019). En la Figura 4 puede ser observado el tamaño de una partícula primaria dentro de una cadena de agregados, mientras que en la Figura 5 diferentes imágenes de aglomerados de hollín con diferente tamaño.

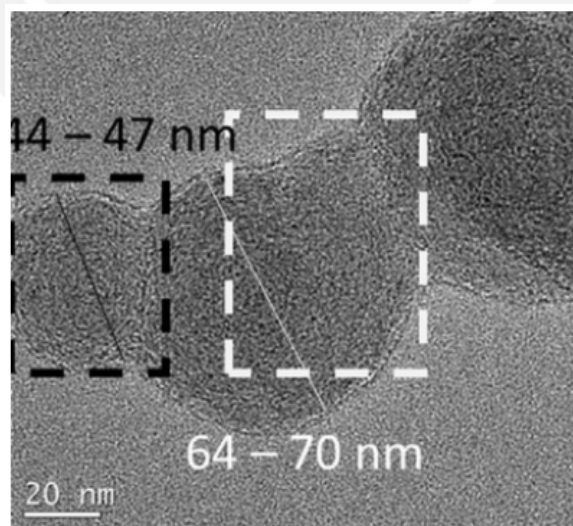


Figura 4. Medida del tamaño de las partículas primarias de hollín de un solo aglomerado (Davis et al., 2019).

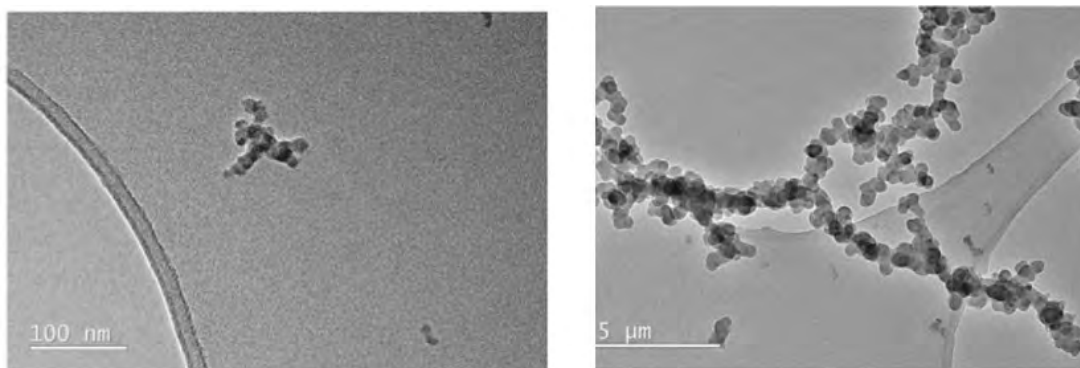


Figura 5. Imágenes de microscopía electrónica de transmisión (TEM) de aglomerados de hollín (Rigopoulos, 2019).

1.2. MECANISMOS DE FORMACIÓN DEL HOLLÍN

Actualmente el camino real de la transición entre la fase gaseosa y la formación de las primeras partículas de hollín es desconocido (Frenklach & Mebel, 2020). Sin embargo, hay un consenso generalizado sobre la existencia de 6 procesos involucrados directamente en la formación y oxidación del hollín, (i) pirólisis, (ii) nucleación, (iii) coalescencia, (iv) crecimiento superficial, (v) agregación y (vi) oxidación. Estos procesos pueden ser visualizados en la Figura 6 y en la Figura 7, donde, debido a la reacción química y la elevada temperatura, la primera etapa denominada pirólisis involucra la descomposición del combustible en pequeñas cadenas de radicales HC (T. Zhang et al., 2019). Estos radicales HC promueven la formación de acetileno (C_2H_2) e hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAH), que, de acuerdo con diversos autores, son los posibles responsables de la formación del hollín (Frenklach, 2002a). La formación de los PAH inicia con la formación del primer anillo aromático, el benceno (C_6H_6 o A1). A lo largo de los años, diferentes vías de formación y crecimiento de los PAH han sido propuestas, una de las vías más universalmente aceptadas es el mecanismo de H -Abstracción- C_2H_2 -Adición (HACA) (Frenklach & Wang, 1991). Este mecanismo consta de dos reacciones químicas y consiste en la abstracción de hidrógeno (H) y adición de acetileno (C_2H_2). La primera reacción es la abstracción de un átomo de radical hidrógeno de un anillo aromático precondensado y el cambio del anillo aromático a un radical hidrocarburo

policíclico, que es más activo. En la segunda reacción, una molécula de acetileno es añadida al lugar del radical libre del anillo o compuesto aromático.

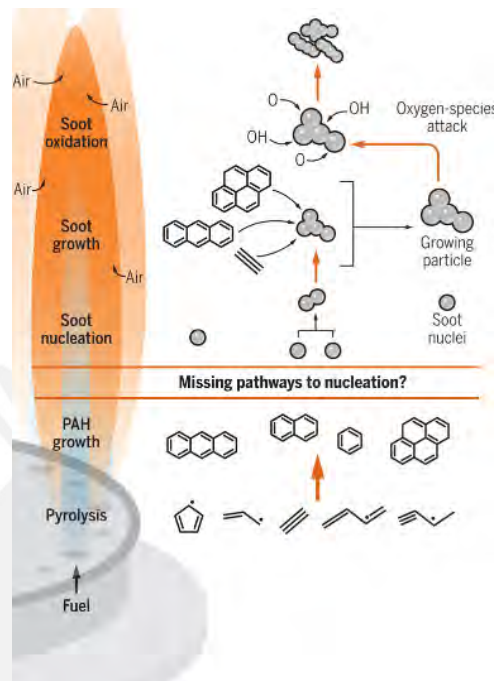


Figura 6. Los procesos físicos y químicos de la formación del hollín (Thomson & Mitra, 2018).

La coalescencia de los PAHs es el mecanismo de nucleación del hollín más utilizado. Mediante una colisión browniana aleatoria, los PAHs grandes colisionan y se coagulan entre sí para crear las primeras y más reducidas partículas de hollín (Frenklach & Wang, 1991). Los elementos formados debido a la coalescencia de los PAH son denominados dímeros. Los dímeros son elementos de fase sólida formados por dos monómeros de PAH apilados. Mercier et al. (2019) mostraron mediante estudios experimentales que existen dímeros de PAH en las proximidades de la zona de nucleación para una llama de difusión laminar de metano. En un estudio más reciente de Frenklach y Mebel (2020) fue concluido que la nucleación del hollín es producida a través de un mecanismo similar al de HACA. A diferencia de los otros mecanismos de nucleación, este estudio demostró que un crecimiento de activación más recurrente favorece la eficiencia del proceso de crecimiento de los PAH. Sin embargo, todavía no hay ningún modelo computacional que implemente y

pruebe este nuevo mecanismo de nucleación. De esta forma, en este trabajo, el modelo propuesto por Frenklach y Wang (1991), así como el modelo de dimerización de PAH de Blanquart y Pitsch (2009), son utilizados. Una vez formado el hollín a través de la coalescencia de 2 dímeros, este evoluciona debido a la interacción física y a la reacción química con las especies en fase gaseosa. Los procesos físicos incluyen la coagulación y la condensación de los PAH, mientras que los procesos químicos incluyen las reacciones superficiales y las de oxidación.

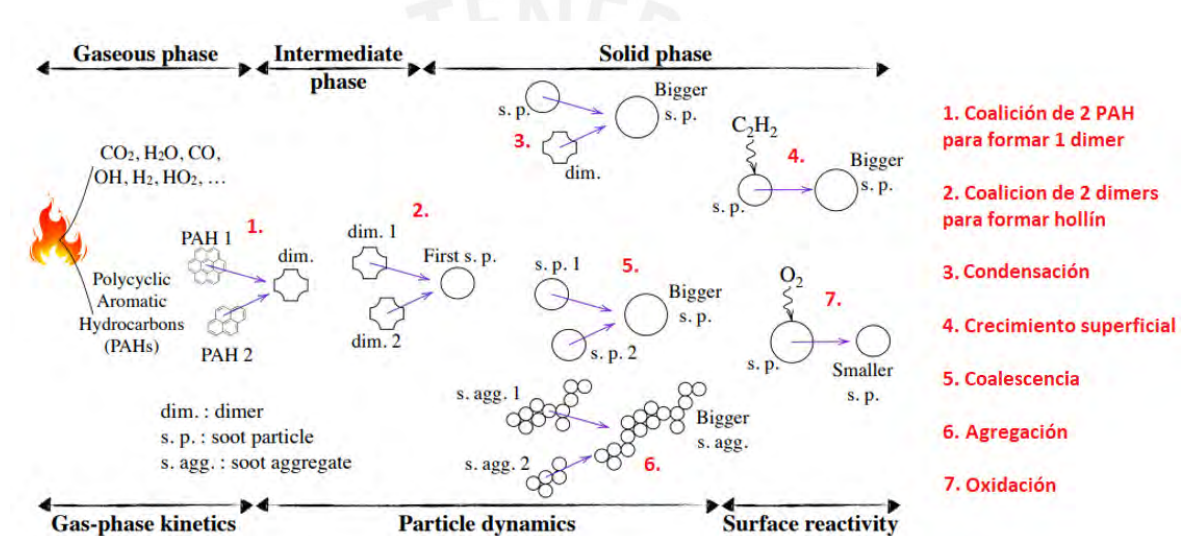


Figura 7. Esquema de los fenómenos fisicoquímicos de la formación del hollín (Maldonado Colmán et al., 2022).

El mecanismo de condensación involucra el aumento del tamaño de partícula de hollín debido a la colisión de los PAH o los dímeros con estas. Cuando un dímero de PAH colisiona con una partícula de hollín, lo más probable es que el dímero débilmente enlazado se rompa y las dos moléculas de PAH sean depositadas en la superficie (Mueller et al., 2009a). Como consecuencia, el volumen de la partícula de hollín que participa en la colisión aumentará y se tornará más esférica por la condensación de la masa en su superficie.

El crecimiento superficial describe las reacciones químicas en la superficie de una partícula de hollín con otras especies químicas presentes en el medio

reactivo. Este crecimiento superficial es producido principalmente a través del mecanismo HACA (Frenklach & Wang, 1991), en el que los enlaces $C - H$ de la superficie del hollín pueden proporcionar sitios de reacción disponibles para absorber las especies gaseosas, y más específicamente el acetileno. El acetileno es considerado como una de las especies gaseosas más importantes en este mecanismo de formación (Pang et al., 2017). En comparación con las partículas de hollín más grandes, el crecimiento superficial de las partículas de hollín pequeñas es mayor debido a que tienen más sitios reactivos disponibles (Polonowski et al., 2011). En general, en comparación con la condensación, la tasa de crecimiento superficial por acetileno es considerada mayor.

El proceso de coagulación consiste en la colisión de partículas de hollín. Cuando la partícula de hollín resultante de la colisión de otras dos partículas más pequeñas es una esfera, la coagulación es denominada habitualmente coalescencia. En cambio, si la partícula resultante conserva la estructura esencial de las partículas que colisionan y se forma un agregado, la coagulación es conocida como agregación. En la Figura 8, estos dos procesos que aumentan significativamente el tamaño de las partículas de hollín y disminuyen el número de ellas sin cambiar la masa total de hollín son mostrados. La velocidad de coagulación es una función del tamaño y la forma de las partículas que colisionan (Mueller et al., 2009a). Así, para modelar el régimen de coagulación, es necesario estimar el número de Knudsen en función de estos factores. Estos factores y los diversos regímenes de coagulación son detallados en el Capítulo 3.

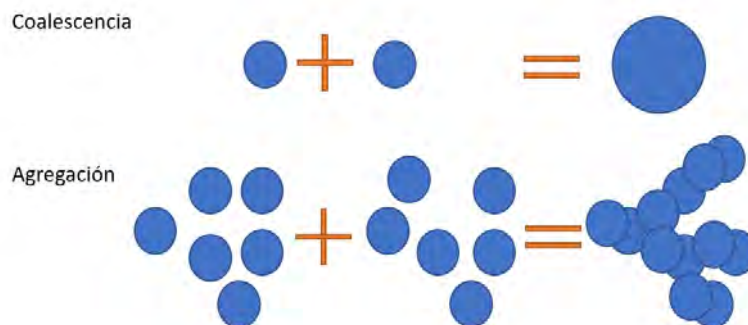


Figura 8. Representación esquemática de los fenómenos de coalescencia y agregación de hollín (Mueller, 2019).

Finalmente, la oxidación del hollín es un proceso que reduce la masa de este, e involucra la conversión parcial o total de las partículas sólidas de hollín en productos en fase gaseosa, como el CO y el CO₂. Esta reducción del tamaño de las partículas de hollín ocurre a través de la oxidación de la superficie de las partículas de hollín cuando estas chocan con los radicales OH y las moléculas de O₂ (Park & Rogak, 2004). Es importante notar que la oxidación de las partículas de hollín puede dar lugar a su fragmentación. El proceso de fragmentación hace que las partículas de hollín disminuyan aún más su tamaño al dividirse en múltiples partículas más pequeñas. Sin embargo, debido a la complejidad de todos los procesos que intervienen en la formación del hollín, la mayoría de los modelos numéricos actuales no tienen en cuenta el fenómeno de fragmentación (Bouaniche, 2020). Contrariamente a lo observado en otros procesos, como, por ejemplo, la nucleación y el crecimiento superficial, los cuales ocurren en un momento específico, la oxidación del hollín ocurre continuamente durante y después de la formación del este.

1.3. MODELAMIENTO DE LA FASE GASEOSA DEL HOLLÍN

Para modelar adecuadamente la formación del hollín es importante disponer de una buena descripción del medio reactivo (fase gaseosa) donde el hollín es formado, pues esta descripción proporciona la información de los precursores del hollín (PAHs) y de las especies implicadas en los distintos mecanismos de formación y oxidación de este. Cuanto mayor es el número de especies y

reacciones químicas presentes en los mecanismos de cinética química usados para describir el medio reactivo, más potencia computacional es requerida. Por lo tanto, los recursos computacionales requeridos para el modelamiento del hollín aumentan en función del número de precursores utilizados y de cuan detallado sea el mecanismo cinético empleado. La Figura 9 muestra el tamaño de los mecanismos cinéticos detallados en función del número de reacciones y número de especies presentes en estos mecanismos. Esta figura indica que el número de especies y reacciones presentes en un mecanismo cinético crece de forma lineal, en términos logarítmicos, a medida que aumenta la complejidad del combustible o se requiere describir más especies químicas. Actualmente existe una gran variedad de mecanismos cinéticos químicos para modelar flujos reactivos. Por ejemplo, una tabla con algunos de los principales mecanismos cinéticos utilizados a lo largo de los años para modelar la formación de hollín en procesos de combustión de hidrocarburos gaseosos es mostrada en el trabajo de (Valencia et al., 2021).

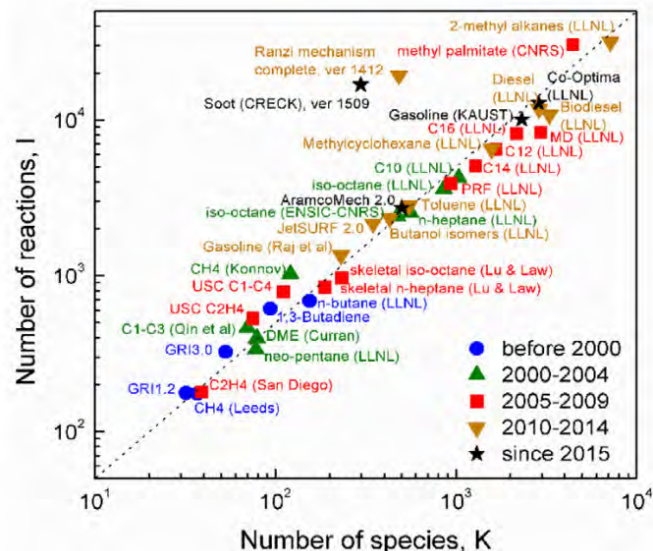


Figura 9. Número de especies y reacciones químicas incluido en diferentes mecanismos cinéticos (Curran, 2019).

Debido a que para el modelamiento del hollín es necesario considerar un número considerable de PAHs, el uso de mecanismos cinéticos detallados es mandatorio. Esto origina un elevado costo computacional haciendo que la

mayoría de las simulaciones de casos prácticos e industriales sean muy costosas o inviables. Por lo tanto, para reducir este tiempo computacional, diferentes técnicas han sido propuestas. Una de ellas involucra el uso de mecanismos cinéticos químicos reducidos. Sin embargo, al tener que resolver las ecuaciones de transporte de todas las especies químicas consideradas, este sigue representando un alto costo. La alternativa a este método es el uso de modelos de combustión basados en la reducción automática mediante química tabulada. En este contexto, el enfoque flamelet (Peters, 2000) es uno de los más populares. En este enfoque, es asumido que una llama puede ser representada por varias llamas unidimensionales, cuyas soluciones son almacenadas en tablas parametrizadas en función de algunas variables de control. Sin embargo, dado que este enfoque fue desarrollado considerando que el proceso químico es relativamente rápido, este método es poco preciso para modelar procesos lentos como la formación de contaminantes. Por lo tanto, en la descripción de la formación de este tipo de contaminantes, un tratamiento especial es requerido en los modelos flamelet (Mueller et al., 2009b).

Capítulo 2 MODELAMIENTO MATEMÁTICO

Las principales características del modelo matemático utilizado en este trabajo para describir flujos turbulentos reactivos con formación de hollín son presentados en este capítulo. En concreto, las ecuaciones que gobiernan este tipo de flujos y los diferentes modelos usados para describir la turbulencia, las reacciones químicas y la radiación son presentados. Adicionalmente, los modelos de hollín de acuerdo con el estado del arte son mencionados y clasificados.

2.1. ECUACIONES GOVERNANTES

En este trabajo, flujos turbulentos a bajo número de Mach y densidad variable son estudiados. Este tipo de flujos es caracterizado con la ecuación de transporte de masa y las ecuaciones cantidad de movimiento (Versteeg & Malalasekera, 2007). Las ecuaciones relacionadas a la energía y especies químicas son tratadas a partir de modelos de combustión, descritos en la sección 2.3.

Masa

La ecuación de conservación de masa (continuidad) es expresada como (Versteeg & Malalasekera, 2007),

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

donde ρ representa densidad y t tiempo, mientras que el vector posición y el vector velocidad son descritos en el sistema de coordenadas cartesianas mediante x_i y u_i , respectivamente.

Cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento viene dada por las ecuaciones de Navier-Stokes (Versteeg & Malalasekera, 2007),

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

donde p hace referencia a la presión, g_i a la gravedad, y τ_{ij} al tensor de esfuerzos viscosos. Nótese que τ_{ij} es estimado aquí de acuerdo con la hipótesis de Stokes y su desarrollo completo está disponible en (Versteeg & Malalasekera, 2007).

2.2. MODELAMIENTO DE LA TURBULENCIA

Flujos turbulentos reactivos son considerados en este trabajo. Esto implica que el fenómeno de la turbulencia necesita ser incluido en las ecuaciones matemáticas usadas en el modelamiento de este tipo de flujos. Para poder entender la turbulencia es necesario la definición de dos conceptos, la cascada de energía (Richardson, 1922) y las hipótesis de Kolmogorov (Kolmogorov, 1890). La idea principal del primer concepto es que la energía es transportada desde remolinos de mayor tamaño (grandes escalas) hacia remolinos cada vez más pequeños (pequeñas escalas), hasta que el efecto de la viscosidad disipa en forma de calor la energía cinética presente en estos remolinos (Pope, 2000). Kolmogorov identificó las escalas de turbulencia, especialmente las pequeñas escalas, las cuales actualmente son denominadas escalas de Kolmogorov. La cascada de energía en función del espectro de energía cinética turbulenta es mostrada esquemáticamente en la

Figura 10 en el caso de una turbulencia homogénea e isotrópica. En esta figura, tres (3) zonas diferentes son descritas. (i) La parte inicial, denominada subrango integral, contiene los torbellinos de mayor tamaño y de mayor energía cinética que será disipada y transferida a las menores escalas. (ii) En la parte intermedia, denominada subrango inercial y alcanzada cuando el flujo es considerado totalmente turbulento, el espectro de energía decae con una pendiente de $-5/3$. (iii) La parte final, descrita como subrango viscoso, ocurre cuando los remolinos son isotrópicos y pequeños, y contiene las pequeñas escalas conocidas como escalas de Kolmogorov.

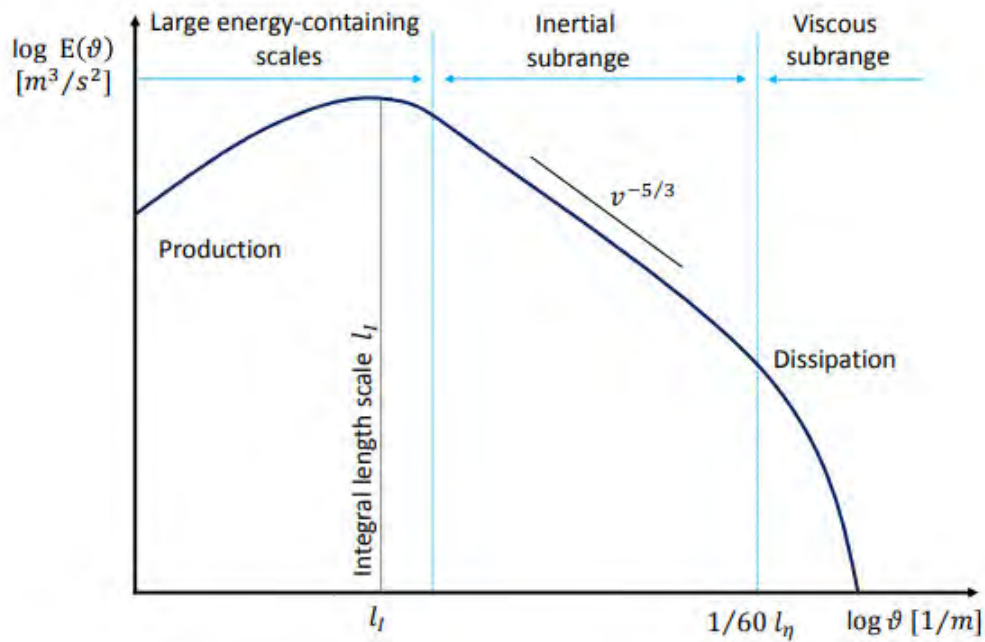


Figura 10. Cascada de energía en flujos turbulentos en función del espectro de energía (R. Mahmoud, 2020).

Para poder modelar la turbulencia en dinámica de fluidos computacional (CFD), existen tres enfoques principales: (i) el método de simulación numérica directa (DNS), (ii) el método de simulación de grandes remolinos (LES), y (iii) el método de Navier Stokes promediado de Reynolds (RANS). El método DNS involucra la resolución de todas las escalas de la turbulencia, mediante la resolución directa de las ecuaciones de Navier-Stokes. Este método requiere una malla computacional y un *time step* lo suficientemente pequeños como para describir todas las escalas de la turbulencia, incluyendo las de Kolmogorov. Debido a que el costo computacional asociado es demasiado elevado, este método suele ser inviable para el modelamiento de procesos de combustión en sistemas prácticos, por lo que no es considerado en este trabajo. En el método LES, las escalas de Kolmogorov son modeladas, mientras que el subrango integral e inercial son resueltos. Uno de los requerimientos de este modelo indica que el 80% de la energía cinética turbulenta sea resuelta (Pope, 2000). En el método RANS, todo el espectro de energía turbulenta es modelado, por lo que el costo computacional

es reducido en gran medida, lo cual lo hace viable para muchas aplicaciones prácticas. La Figura 11 muestra una representación de la velocidad en función del tiempo y contornos de velocidad obtenidos a partir del uso de los tres abordajes discutidos aquí.

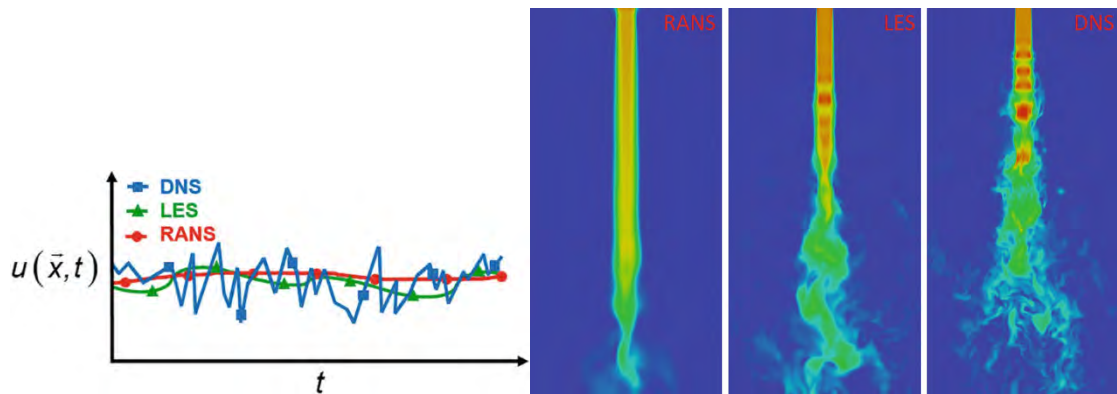


Figura 11. Comparación de velocidades instantáneas para un jet turbulento usando RANS, LES, DNS (Rodríguez, 2019)

En este trabajo, para poder producir resultados aceptables de acuerdo con el estado del arte, simulaciones numéricas LES son realizadas. Este abordaje ha sido utilizado debido al alto grado de detalle obtenido con el mismo (Ihme & Pitsch, 2008). El abordaje RANS también ha sido utilizado aquí, pero solamente durante el proceso de implementación de los modelos de formación hollín estudiados. Esto obedece al hecho de que múltiples simulaciones numéricas han sido requeridas durante esta etapa y el modelo RANS tiene un bajo costo computacional.

2.2.1. RANS

Este abordaje es uno de los más utilizados en la actualidad debido a su bajo costo computacional en contraste con los abordajes LES y DNS. En este abordaje, todas las fluctuaciones turbulentas son promediadas y sólo son resueltas las ecuaciones que rigen las propiedades medias del flujo. De este modo, las propiedades instantáneas del flujo φ quedan divididas en propiedades medias promediadas en el tiempo $\bar{\varphi}$ y propiedades fluctuantes φ' , de la siguiente manera (Pope, 2000),

$$\varphi(x_i, t) = \bar{\varphi}(x_i) + \varphi'(x_i). \quad (3)$$

En flujos con densidad variable, las medias de Favre $\tilde{\varphi}$ son introducidas (Favre, 1969),

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\bar{\rho}}. \quad (4)$$

En abordajes RANS, las ecuaciones de transporte de masa y cantidad de movimiento son expresadas como indicadas a continuación (Pope, 2000).

Masa

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (5)$$

Cantidad de movimiento

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''})}{\partial x_i}. \quad (6)$$

En este caso, u_i'' hace referencia a la fluctuación sobre la media de Favre de la velocidad \tilde{u}_i , y $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ es definido como el tensor de Reynolds, el cual es modelado mediante la ecuación de Boussinesq (J. Boussinesq, 1897),

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \bar{p} k \delta_{ij}, \quad (7)$$

donde el termino μ_t representa la viscosidad turbulenta, δ_{ij} es el Kronecker delta y k es la energía cinética turbulenta definida como $k = \overline{u_i'' u_i''}$.

Existen varios enfoques para poder modelar los efectos de la turbulencia en contextos RANS (Pope, 2000). El enfoque utilizado en este trabajo para determinar la viscosidad turbulenta μ_t , requerida en el modelamiento del tensor de Reynolds, es el modelo $k - \varepsilon$ (Launder & Sharma, 1974). Este modelo ha sido escogido para fines de verificación aquí debido a que en la literatura existen diversas simulaciones numéricas de formación de hollín realizadas con este mismo modelo. Nótese que las simulaciones RANS sólo han sido utilizadas con la finalidad de ahorrar tiempo computacional en la implementación de los

modelos de formación hollín. Dado que el propósito de este trabajo es el uso de abordajes LES, otros modelos RANS más detallados no han sido considerados. En modelos $k - \varepsilon$, dos ecuaciones de transporte adicionales son resueltas, (i) una ecuación es para resolver la energía cinética turbulenta k y (ii) la otra ecuación para la tasa de disipación ε .

Transporte de energía cinética turbulenta

La ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta resuelta en este trabajo es expresada como (Versteeg & Malalasekera, 2007),

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \left(\mu + \frac{\mu_t}{Sc_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) + \tilde{G}_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}, \quad (8)$$

donde Sc_k es una constante del modelo, y el término G_k representa la producción de la energía cinética turbulenta, cuya expresión es una función del tensor de velocidad de deformación S_{ij} .

Transporte de tasa de disipación

Asimismo, la tasa de disipación es calculada aquí de acuerdo con (Versteeg & Malalasekera, 2007),

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \left(\mu + \frac{\mu_t}{Sc_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) + C_{\varepsilon 1} \tilde{G}_k \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} - C_{\varepsilon 2} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}, \quad (9)$$

donde Sc_ε , $C_{\varepsilon 1}$ y $C_{\varepsilon 2}$ son constantes del modelo, la cuales son obtenidas de Jones and Launder (1972). Finalmente, la viscosidad turbulenta μ_t es obtenida a partir de k y ε ,

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (10)$$

donde C_μ es otra constante del modelo (Jones & Launder, 1972).

2.2.2. LES

En términos de costos, este abordaje está en una posición intermedia entre RANS y DNS, pero sigue siendo bastante intensivo desde el punto de vista

computacional para flujos con números de Reynolds elevados. La idea principal en este abordaje es resolver los torbellinos producidos por la turbulencia hasta que no haya anisotropía en estos, es decir, hasta que el subrango inercial o la pendiente de $-5/3$ sean alcanzados (Pope, 2000). La parte restante de la turbulencia, denominada escalas de Kolmogorov, es modelada aplicando un modelo de sub-malla. Para lograr ello, es necesario que las ecuaciones gobernantes originales sean filtradas espacialmente en lugar de temporalmente. Por lo tanto, en este abordaje, cualquier cantidad filtrada $\bar{\varphi}$ es descrita por (Rodríguez, 2019)

$$\bar{\varphi}(x) = \int_V G(x - x')\varphi(x')dx', \quad (11)$$

donde G es la función de filtro (Leonard, 1975), mientras los términos $\bar{\varphi}$ y φ hacen referencia a las cantidades filtradas y no filtradas respectivamente, para una posición x en el dominio. La función de filtrado es efectuada eligiendo una escala de filtro Δ . En particular, si el tamaño del remolino es igual al filtro, dicho remolino queda resuelto, pero si el remolino es menor al tamaño del filtro, este es modelado mediante un modelo sub-malla SGS (sub-grid scale). El filtro es obtenido a partir de la raíz cubica del volumen de los elementos de la malla computacional utilizada, $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$. Al igual que en el caso RANS, es una ventaja el uso de las medias de Favre. Por lo tanto, cualquier cantidad φ queda descrita por la siguiente ecuación (Rodríguez, 2019),

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi^{sgs}, \quad (12)$$

donde $\tilde{\varphi}$ es la cantidad filtrada y φ^{sgs} es la parte no resuelta o modelada. Una vez aplicado el filtro, las ecuaciones de transporte de masa, cantidad de movimiento, energía, y de especies son expresadas como indicadas a continuación (Rodríguez, 2019).

Masa

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (13)$$

Cantidad de movimiento

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}^{SGS}}{\partial x_i}, \quad (14)$$

donde el termino τ_{ij}^{SGS} hace referencia al tensor de tensiones sub-malla que aparece debido a la función de filtrado G ,

$$\tau_{ij}^{SGS} = \bar{\rho} \tilde{\mu}_i \tilde{\mu}_j - \bar{\rho} \tilde{\mu}_i \tilde{\mu}_j. \quad (15)$$

El término sub-malla τ_{ij}^{SGS} es generado a partir del filtraje de las ecuaciones gobernantes. Para que las ecuaciones descritas en esta Sección 2.2.2 puedan ser resueltas, este término sub-malla necesita un cierre. Es decir, este término debe de determinarse mediante un modelo sub-malla adecuado.

El modelo sub-malla utilizado en este trabajo para modelar el tensor de tensiones sub-malla τ_{ij}^{SGS} pertenece al grupo de modelos basados en la aproximación de Boussinesq (1897), donde los tensores de escala sub-malla actúan como términos adicionales de difusión. Es así como aparece el termino de viscosidad efectiva μ_{eff} , el cual es obtenido a partir de la viscosidad molecular μ y la viscosidad turbulenta o sub-malla μ_{SGS} (Rodriguez, 2019),

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_{SGS}. \quad (16)$$

De este modo, siguiendo la aproximación de Boussinesq, el tensor de tensiones sub-malla τ_{ij}^{SGS} es formulado como,

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \tau_{kk}^{SGS} \delta_{ij} = -\mu_{SGS} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right), \quad (17)$$

donde los dos primeros términos τ_{ij}^{SGS} y τ_{kk}^{SGS} denotan las partes anisotrópicas e isotrópica de los tensores de Reynolds, respectivamente. \tilde{S}_{ij} es la tasa de deformación del campo resuelto y $\tilde{S}_{ij} : \tilde{S}_{ij} = \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}$.

La viscosidad turbulenta μ_{SGS} es calculada en este trabajo usando el modelo WALE (wall-adapting local eddy-viscosity), el cual incluye una expresión de la forma (Ducros et al., 1998),

$$\mu_{SGS} = (C_w \Delta)^2 \frac{(\tilde{S}_{ij}^d : \tilde{S}_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} : \tilde{S}_{ij})^{3/2} + (\tilde{S}_{ij}^d : \tilde{S}_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (18)$$

donde C_w es una constante del modelo WALE equivalente a 0.33. Para compensar las deficiencias del modelo clásico de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963), Ducros et al. (1998) introdujo el termino \tilde{S}_{ij}^d , en función del tensor gradiente de velocidad,

$$\tilde{S}_{ij}^d = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ij}^2) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{g}_{kk}^2, \quad (19)$$

$$\tilde{g}_{ij}^2 = \frac{\partial \tilde{u}_i}{x_j}, \quad (20)$$

2.3. MODELOS DE COMBUSTIÓN

Una formulación bastante habitual en estudios de combustión no pre-mezclada es la asociada con el método flamelet, desarrollado por Peters a principios de los años 80 (Peters, 1984). En este contexto, el término flamelet hace referencia a un conjunto de llamas de difusión laminar, las cuales juntas representan una llama turbulenta. La idea básica detrás de este método es separar la complejidad que conlleva los procesos de reacción química de las soluciones numéricas de los campos de flujo turbulento y de mezcla (Peters, 2000). Los flamelets son calculados en un paso de preprocesamiento y son almacenados para su uso posterior en unas tablas denominadas "librería de flamelets". En este trabajo, dos abordajes diferentes de flamelets, el steady laminar flamelet (SLF) (Peters, 2000) y el flamelet progress variable (FPV) (Pierce & Moin, 2004) han sido utilizados. En esta sección, ambos abordajes son brevemente descritos.

2.3.1. Steady laminar flamelet (SLF)

En este método, las propiedades termodinámicas y fracciones de masa de cada especie química pueden extraerse de la librería de flamelets, las cuales están relacionadas con la fracción de mezcla Z y la tasa de disipación χ . Estas propiedades son obtenidas mediante la solución de las ecuaciones estacionarias de flamelets, definida por Peters (2000) como,

$$-\rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} = \omega, \quad (21)$$

donde ϕ es el vector que contiene a las fracciones de masa de las especies y a la temperatura, mientras que ω denota los términos fuente respectivos. El término de tasa de disipación χ aparece como un parámetro externo y está definido como (Peters, 2000),

$$\chi = 2D_z(\nabla Z)^2 \quad (22)$$

donde D_z es la difusividad molecular de la fracción de mezcla. En este trabajo, la tasa de disipación escalar χ es parametrizada en función de la tasa de disipación escalar en la estequiometría χ_{st} . De esta forma, la temperatura, así como las fracciones de masa de las especies, son tabuladas en función de Z y χ_{st} ,

$$\phi = \phi(Z, \chi_{st}). \quad (23)$$

Por lo tanto, los valores promedio del vector ϕ son calculados utilizando una función de densidad de probabilidad (PDF) de la siguiente forma (Peters, 2000),

$$\bar{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(Z, \chi_{st}) P(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st}, \quad (24)$$

donde la función probabilidad $P(Z, \chi_{st})$ es descompuesta asumiendo una independencia estadística entre Z y χ_{st} ,

$$P(Z, \chi_{st}) = P(Z)P(\chi_{st}). \quad (25)$$

En este trabajo, la forma de la PDF presumida para la tasa de disipación escalar es una función Dirac simple, mientras que para la fracción de mezcla es una función tipo Beta.

Para poder utilizar el método SLF es necesario resolver 2 ecuaciones de transporte adicionales, (i) una ecuación para la media de la fracción de mezcla \bar{Z} y (ii) otra para la varianza de esta \bar{Z}''^2 ,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right), \quad (26)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \right) + 2\mu_{eff} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho} \tilde{\chi}, \quad (27)$$

las cuales remplazan a las ecuaciones de transporte de entalpia y especies químicas. Debido a que χ_{st} es obtenida a partir de Z , no es necesario una ecuación de transporte para este término. Por ejemplo, en contextos RANS, la tasa estequiométrica de disipación escalar es expresada como $\chi_{st} = C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \tilde{Z}''^2$, donde C_χ es una constante empírica del modelo (Peters, 2000).

2.3.2. Flamelet progress variable (FPV)

La solución de las ecuaciones flamelet suele representarse mediante la denominada curva en forma de S, la cual es mostrada en la Figura 12. En esta figura, las ramas superior e inferior describen las soluciones estables de combustión y no combustión, respectivamente, y la rama central las soluciones inestables (Pierce & Moin, 2004). El punto de transición entre la rama superior y la central está definido por un valor de tasa de disipación escalar χ_q . Dado que existen múltiples soluciones para un mismo valor de χ , el abordaje SLF solo considera la rama estable de combustión. Esto genera que los estados intermedios entre combustión y sin combustión no puedan ser descritos adecuadamente.

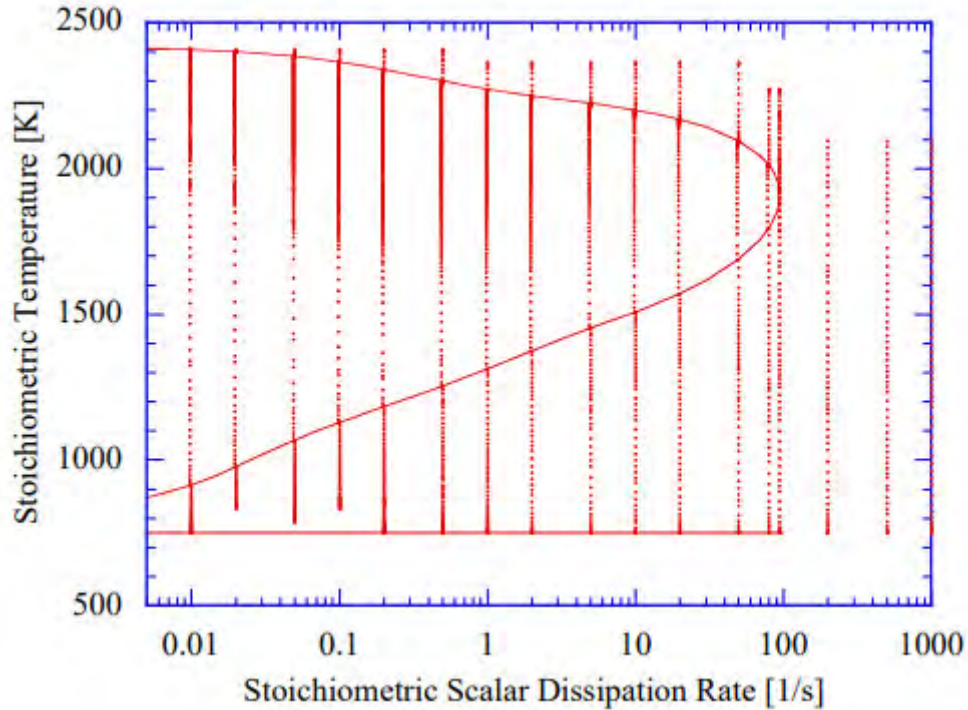


Figura 12. Temperatura estequiométrica en función de la tasa de disipación escalar estequiométrica (Pitsch & Ihme, 2005)

Para corregir la deficiencia descrita, el abordaje FPV introduce un parámetro adicional denominado variable de progreso C , un escalar reactivo que identifica de forma única cada estado de la llama individual a lo largo de la curva en forma de S. Este parámetro es una combinación lineal de los productos de la reacción química. En este trabajo, las especies químicas empleadas por Pitsch e Ihme (2005), involucrando CO_2 , H_2O , CO y H_2 , son utilizadas. Así, en este abordaje, los valores promedio del vector ϕ , $\phi = \phi(Z, C)$, están definidos en función de la fracción de mezcla y de la variable de progreso (Pierce & Moin, 2004),

$$\tilde{\phi} = \int_{C_{min}}^{C_{max}} \int_0^1 \phi(Z, C) \tilde{P}(Z, C) dZ dC, \quad (28)$$

y, debido a que Z y C son asumidos estadísticamente independientes, la función densidad de probabilidad (PDF) queda descrita como,

$$P(Z, C) = P(Z)P(C), \quad (29)$$

donde la forma de la PDF para la variable de progreso es una función Dirac simple (Pierce & Moin, 2004), y una función tipo Beta para la fracción de mezcla.

Finalmente, para poder utilizar este método FPV, una vez que la variable de progreso no puede expresarse en función de Z , es necesario resolver 3 ecuaciones de transporte adicionales (Pierce & Moin, 2004),

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right], \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \right] + C_g \bar{\rho} D_t \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \bar{\rho} D_t \frac{\tilde{Z}''^2}{\Delta^2}, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{C}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_c, \quad (32)$$

donde D es la difusividad de masa, D_t es la difusividad turbulenta, C_g y C_d son constantes empíricas del modelo, y $\bar{\omega}_c$ es el término fuente de la variable de progreso obtenido de la librería de flamelets.

2.4. MODELO DE RADIACIÓN

En este trabajo, el modelo de radiación ópticamente delgado (Guo et al., 2004) es empleado. Este enfoque simplificado sólo considera la emisión de radiación y desprecia la reabsorción. Este método permite predecir razonablemente bien el comportamiento de varias llamas de laboratorio, pero sobrestima ligeramente la radiación (Cuoci et al., 2008). En este método, en la ecuación de transporte de energía, el efecto de la radiación es introducido vía un término fuente de la forma (Cuoci et al., 2008),

$$Q_r = -4\sigma a(T^4 - T_{env}^4), \quad (33)$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann, a es el coeficiente de absorción medio de Planck de la mezcla de gases, y T_{env} es la temperatura ambiente. En

este modelo, las contribuciones individuales de H_2O , CO_2 , CO , CH_4 y el hollín son incluidas según (Barlow et al., 2001),

$$a = p_{H_2O} a_{p,H_2O} + p_{CO_2} a_{p,CO_2} + p_{CO} a_{p,CO} + p_{CH_4} a_{p,CH_4} + f_v a_{soot}, \quad (34)$$

donde p_i es la presión parcial de la especie química i , f_v es la fracción volumétrica de hollín, y $a_{p,i}$ es función de la temperatura y de los coeficientes de extinción mostrados en la Tabla 1. La Ec. (35) es empleada para H_2O y CO_2 , y la Ec. (36) para CO y CH_4 .

$$a_p = c_0 + c_1 \left(\frac{1000}{T} \right) + c_2 \left(\frac{1000}{T} \right)^2 + c_3 \left(\frac{1000}{T} \right)^3 + c_4 \left(\frac{1000}{T} \right)^4 + c_5 \left(\frac{1000}{T} \right)^5, \quad (35)$$

$$a_p = c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 + c_4 T^4. \quad (36)$$

Tabla 1. Coeficientes de extinción para H_2O , CO_2 , CO , CH_4 (Barlow et al., 2001).

Coeficiente	H_2O	CO_2	CH_4	CO	CO
				$300 \leq T \leq 750$	$750 \leq T \leq 2500$
c_0	-0.23093	18.741	6.6334	4.7869	10.09
c_1	-1.12390	-121.310	-0.0035686	-0.06953	-0.01183
c_2	9.41530	273.500	1.6682×10^{-8}	2.95775×10^{-4}	4.7753×10^{-6}
c_3	-2.99880	-194.050	2.5611×10^{-10}	-4.25732×10^{-7}	-5.87309×10^{-10}
c_4	0.51382	56.310	-2.6558×10^{-14}	2.02894×10^{-10}	-2.5534×10^{-14}
c_5	-1.86840	-5.8169	---	---	---

Nótese que el coeficiente de extinción del hollín es evaluado mediante,

$$a_{soot} = 1232 \rho_{soot} [1 + 4.8 * 10^{-4} (T - 2000)]. \quad (37)$$

2.5. MODELOS DE FORMACIÓN DE HOLLÍN

Kennedy (1997) clasifica los modelos de formación de hollín en 3 categorías, (i) modelos empíricos, (ii) modelos semi-empíricos y (iii) modelos detallados. Los modelos empíricos involucran ecuaciones algebraicas que relacionan parámetros como temperatura y fracción de mezcla con el hollín. Los modelos semi-empíricos consideran los precursores del hollín (acetileno, en la mayoría de los casos) y resuelven ecuaciones de transporte para parámetros

característicos del hollín como, por ejemplo, su fracción másica. Los modelos detallados de formación de hollín incluyen a los PAH como precursores, la cinética química detallada del hollín y la dinámica de los aerosoles. De esta forma, estos últimos modelos presentan un costo computacional relativamente grande. En el pasado, los modelos más empleados eran los empíricos y semi-empíricos. En la actualidad, el estado del arte relativo al modelamiento de la formación del hollín involucra modelos detallados. Por lo tanto, en este trabajo, 3 modelos detallados de formación de hollín son evaluados. Los referidos modelos son descritos en el siguiente capítulo.



Capítulo 3 MODELAMIENTO DE HOLLÍN

Los principales abordajes utilizados en la actualidad para el modelamiento de la formación de partículas de hollín son descritos en el presente capítulo. Una especial atención es prestada a los modelos detallados de formación de hollín. Así, el concepto de dinámica de aerosoles empleado para describir el fenómeno de colisión de partículas en los modelos detallados de formación de hollín es inicialmente descrito. Las ecuaciones caracterizando el modelo semi empírico de 2 ecuaciones son desarrolladas a seguir. Finalmente, los 3 modelos detallados de formación de hollín evaluados en este trabajo son discutidos en detalle.

3.1. DINÁMICA DE AEROSOLES

Los modelos detallados usados para describir la formación de hollín están basados en el transporte de la función de distribución del tamaño de partícula de hollín (NDF). En este abordaje la evolución temporal del conjunto de partículas de hollín es descrita mediante la ecuación de equilibrio de población PBE, basada originalmente en las ecuaciones de coagulación discretas de Smoluchowski (1917),

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = - \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{1,j} N_1 N_j , \quad (38)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j,i-j} N_j N_{i-j} - \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{i,j} N_i N_j , \quad (39)$$

donde N_i denota la densidad de número de partículas de hollín de tamaño i , y $\beta_{i,j}$ es la frecuencia de colisión entre partículas de tamaño i y j . Los términos positivos en las Ec. (38) y (39) corresponden a las partículas adicionadas a la clase de tamaño i , mientras que los términos negativos hacen referencia a la pérdida de partículas de esta clase. Estas últimas partículas son transferidas a una clase de mayor tamaño debido a la colisión entre partículas.

El coeficiente de colisión β depende a su vez del régimen de coagulación, clasificado en función del número de Knudsen (Frenklach, 2002b),

$$k_n = \frac{\lambda}{d_s}, \quad (40)$$

donde λ es el camino libre medio del gas y d_s es el diámetro de la partícula de hollín. En función del valor de k_n , la colisión de partículas puede estar en 3 diferentes regímenes. Si el número de Knudsen es mayor a 10 el régimen es libre molecular, mientras que si el número de Knudsen es menor a 0.1 el régimen es continuo. Para el caso de valores intermedios de Knudsen, un régimen transitorio, en el que el factor de frecuencia de colisión es aproximado como la media armónica de los otros 2 regímenes, es considerado.

3.2. MODELO SEMI EMPÍRICO

El modelo semi empírico de 2 ecuaciones (Brookes & Moss, 1999) es caracterizado por su eficiencia computacional y su simplicidad. En este modelo no es posible describir la NDF. Esto ocurre debido a que una distribución monodispersa de hollín es asumida, donde todas las partículas de hollín tienen el mismo tamaño y forma esférica. En este modelo, como mostrado en la Figura 13, un valor de densidad de número de partículas de hollín es obtenido para un tamaño fijo.

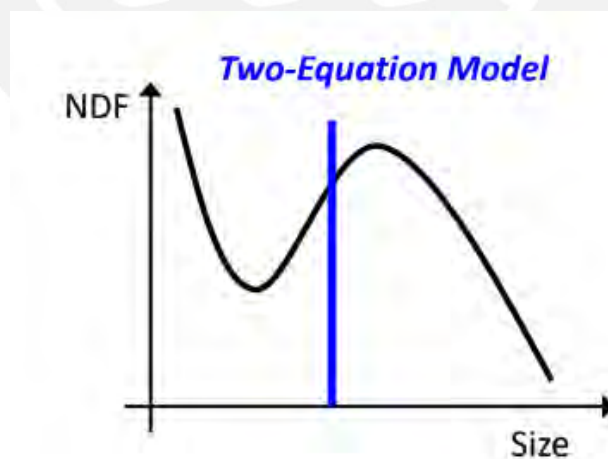


Figura 13. Función densidad de número de partículas de hollín para el método de 2 ecuaciones (Mueller, 2019)

Según el modelo semi empírico en discusión, el hollín es calculado a partir de las ecuaciones de transporte resueltas para la fracción de masa de hollín Y_s , Ec.

(41) y la concentración normalizada de núcleos de hollín b_{nuc} , Ec. (42) (Liu et al., 2002),

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_s}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(0.55 \frac{\mu_{eff}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} Y_s \right) + \frac{dM}{dt}, \quad (41)$$

$$\frac{\partial \rho b_{nuc}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j b_{nuc}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(0.55 \frac{\mu_{eff}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} b_{nuc} \right) + \frac{1}{N_{norm}} \frac{dN}{dt}. \quad (42)$$

Aquí M y N representan la concentración de masa de hollín y la densidad del número de partículas de hollín, respectivamente. Dado que el hollín no está en fase gaseosa, la difusión molecular no es considerada. En su lugar, el primer término de lado derecho de las Ec. (41) y (42), denominado Termoforesis, es utilizado. La tasa de concentración de núcleos $\frac{dN}{dt}$ y la tasa de fracción de masa $\frac{dM}{dt}$ son términos fuente utilizados para modelar la contribución en la formación de hollín de la nucleación, coagulación, crecimiento superficial y oxidación. Estos términos fuente son dados por (Brookes & Moss, 1999),

$$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{dN}{dt} \right)_{nucleation} - \left(\frac{dN}{dt} \right)_{coagulation}, \quad (43)$$

$$\frac{dM}{dt} = \left(\frac{dM}{dt} \right)_{nucleation} + \left(\frac{dM}{dt} \right)_{surface\ growth} - \left(\frac{dM}{dt} \right)_{oxidation}. \quad (44)$$

Los modelos de tasas de nucleación, coagulación, crecimiento superficial y oxidación empleados en este trabajo son aquellos propuestos por Brookes y Moss (1999), donde el hollín es modelado mediante una reacción de un solo paso de acetileno. Para la oxidación, OH y O_2 son consideradas como especies oxidantes. De esta forma, cada uno de los términos que aparecen en la Ec. (43) y (44) están descritos por,

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{nucleation} = C_\alpha \cdot N_A \left(\frac{X_{C_2H_2} P}{RT} \right)^l e^{-\frac{T_\alpha}{T}}, \quad (45)$$

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{coagulation} = C_\beta \cdot \left(\frac{24RT}{\rho_{soot} N_A} \right)^{0.5} \cdot d_p^{0.5} \cdot N^2, \quad (46)$$

$$\left(\frac{dM}{dt} \right)_{nucleation} = C_\alpha \cdot M_p \left(\frac{X_{C_2H_2} P}{RT} \right)^l e^{-\frac{T_\alpha}{T}}, \quad (47)$$

$$\left(\frac{dM}{dt}\right)_{surface\ growth} = C_\gamma \cdot \left(\frac{X_{C_2H_2}P}{RT}\right)^m e^{-\frac{T_\gamma}{T}} \cdot \left[(\pi N)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{6M}{\rho_s N_A}\right)^{\frac{2}{3}}\right]^n, \quad (48)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{dM}{dt}\right)_{oxidation} &= C_{oxid} \cdot \sqrt{T} (\pi N)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{6M}{\rho_s N_A}\right)^{\frac{2}{3}} \\ &\cdot \left[C_{w,1} \cdot \eta_{coll} \left(\frac{X_{OHP}}{RT}\right) e^{-\frac{T_{w,1}}{T}} + C_{w,2} \cdot \left(\frac{X_{O_2}P}{RT}\right) e^{-\frac{T_{w,2}}{T}} \right], \end{aligned} \quad (49)$$

donde X_i es la fracción másica de la especie i , y C_α , C_β , C_γ , C_{oxid} , $C_{w,1}$ y $C_{w,2}$ son factores empíricos para las tasas de nucleación, coagulación, crecimiento superficial y oxidación, respectivamente. Además η_{coll} representa el parámetro de eficiencia de colisión en la velocidad de oxidación, mientras que T_α , T_γ , $T_{w,1}$ y $T_{w,2}$ son temperaturas de activación para cada mecanismo de formación de hollín. Finalmente, l , m , n son constantes de modelo determinadas de forma a producir un ajuste adecuado de los datos usados como referencia (Brookes & Moss, 1999).

3.3. MÉTODO DE MOMENTOS CON CIERRE INTERPOLATIVO (MOMIC)

Este modelo detallado de formación de hollín es uno de los más usados debido a su sencillez, robustez y bajo costo computacional (Wick et al., 2020). En este modelo, la NDF es descrita solo por un número finito de momentos estadísticos de orden inferior. Es decir, la NDF es reconstruida a partir de estos momentos, conforme a la Figura 14. Este modelo tiene una limitación debido a que no es capaz de describir la bimodalidad de la NDF (no es capaz de predecir las primeras partículas de hollín).

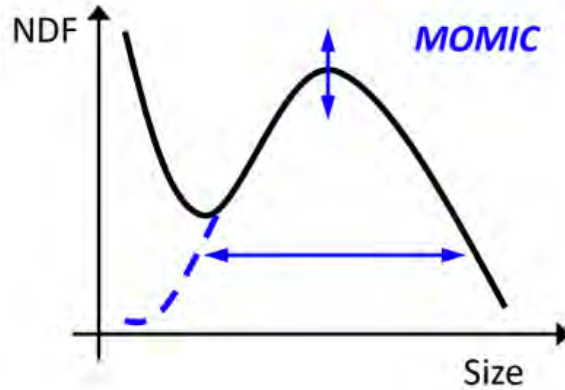


Figura 14. Función densidad de número de partículas de hollín para el método MOMIC (Mueller, 2019)

En este abordaje, el momento de orden r -ésimo de la densidad de número de partículas N_i , Ec. (50), y el momento reducido μ_r , Ec. (51), están descritos como (Balthasar & Frenklach, 2005),

$$M_r = \sum_{i=1}^{\infty} m_i^r N_i, \quad (50)$$

$$\mu_r = \frac{M_r}{M_0}, \quad (51)$$

dónde m_i y N_i representan la masa y el número de partículas de tamaño i , respectivamente. El momento del orden cero M_0 y el momento de primer uno M_1 tienen interpretaciones físicas, M_0 es la densidad total del número de partículas y M_1 , cuando es dividido por la densidad de hollín, representa la fracción volumétrica de hollín. La ecuación de transporte para el r -ésimo momento, al igual que la Ec. (41) y (42), incluye la termoforesis en lugar de la difusión molecular. Esta ecuación está dada por (Frenklach, 2002b),

$$\frac{\partial \rho M_r}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j M_r}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(0.55 \frac{\mu_{eff}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} M_r \right) + \frac{\partial M_r}{\partial t}, \quad (52)$$

donde $\frac{\partial M_r}{\partial t}$ es el término fuente de la ecuación de transporte de momento r , que contiene la contribución de la nucleación de partículas de hollín, coagulación y reacciones heterogéneas con especies en fase gaseosa. Una forma general de estos términos fuente es expresada como (Frenklach, 2002b),

$$\frac{\partial M_r}{\partial t} = R_r + G_r + W_r, \quad (53)$$

donde R_r , G_r y W_r son los términos fuente debidos a la nucleación, coagulación, crecimiento superficial y oxidación, respectivamente. Como resultado en las siguientes subsecciones, hay varias descripciones matemáticas en la literatura para cada uno de estos términos fuente (Appel et al., 2000; Frenklach, 2002b; Kazakov & Frenklach, 1998).

3.3.1. Nucleación

La nucleación del hollín es generalmente modelada como la coagulación entre dos moléculas de PAH. En este trabajo, debido a su simplicidad al no necesitar de ecuaciones de transporte de momentos adicionales como ocurre en otros modelos, la formulación propuesta por Rezvan (Rezvan, 2002) (Frenklach y Wang, 1994),

$$R_0 = \epsilon \sqrt{\frac{4\pi k_B}{m_C N C_{PAH}}} (d_{PAH} N_{PAH})^2, \quad (54)$$

$$R_r = 2 N C_{PAH} R_{r-1}, \quad (55)$$

es utilizada. Aquí m_C representa la masa de un átomo de carbono, $N C_{PAH}$ es el número de átomos de carbono en una molécula de PAH, d_{PAH} es el diámetro de la molécula de PAH, N_{PAH} es la densidad de número de moléculas de PAH, k_B es la constante de Boltzmann y ϵ es el factor de mejora de Van der Waals.

3.3.2. Coagulación

La coagulación es el proceso en que partículas de hollín chocan entre sí para formar partículas esféricas más grandes. Como descrito anteriormente, el fenómeno de coagulación está basado en las ecuaciones de Smoluchowski, Ec. (38) y (39), las cuales dependen del número de Knudsen k_n para determinar el régimen de coagulación.

Primero, en el régimen de coagulación continuo, caracterizada por $k_n < 0.1$, los términos fuente de coagulación están dados por expresiones de la forma (Frenklach, 2002b),

$$G_0^c = K_C M_0^2 \left[1 + \mu_{\frac{1}{3}} \mu_{-\frac{1}{3}} + K_C' (\mu_{-\frac{1}{3}} + \mu_{\frac{1}{3}} \mu_{-\frac{2}{3}}) \right], \quad (56)$$

$$G_r^c = \frac{1}{2} K_C \sum_{k=1}^{r-1} \binom{r}{k} \left[2\mu_k \mu_{r-k} + \mu_{k+\frac{1}{3}} \mu_{r-k-\frac{1}{3}} + \mu_{k-\frac{1}{3}} \mu_{r-k+\frac{1}{3}} + K_C' (\mu_{k-\frac{1}{3}} \mu_{r-k} + \mu_k \mu_{r-k-\frac{1}{3}} + \mu_{k+\frac{1}{3}} \mu_{r-k-\frac{2}{3}} + \mu_{k-\frac{2}{3}} \mu_{r-k+\frac{1}{3}}) \right] M_0^2, \quad (57)$$

donde K_C and K_C' son descritos por (Frenklach, 2002b),

$$K_C = \frac{2k_B T}{3\eta}, \quad (58)$$

$$K_C' = 2.514\lambda(\pi\rho/6)^{1/3}. \quad (59)$$

Aquí η representa la viscosidad molecular de la mezcla de gases.

Para determinar los términos fuente de coagulación es necesario conocer los momentos estadísticos reducidos, de orden fraccionario y negativos que aparecen en las Ec. (56) y (57). En el modelo MOMIC, los momentos de orden alto, negativo y fraccionario son determinados a partir de los primeros momentos de orden bajo usando una interpolación de Lagrange (Frenklach, 2002b). Wick et al. (2020) enfatizan que una buena precisión de interpolación es obtenida usando solamente 3 momentos. Por lo tanto, en este trabajo, los momentos faltantes son calculados de,

$$\log(\mu_p) = L_p(\log(\mu_0), \log(\mu_1), \log(\mu_2)), \quad (60)$$

donde L_p es la función de interpolación de Lagrange obtenida a partir de los 3 primeros momentos y p representa el orden del momento reducido μ_p a determinar.

Segundo, en el régimen de coagulación libre molecular, caracterizado por $k_n > 10$, los términos fuente de coagulación están dados por las siguientes ecuaciones (Frenklach, 2002b),

$$G_0^f = \frac{K_f}{2} M_0^2 f_{\frac{1}{2}}^{0,0}, \quad (61)$$

$$G_r^f = \frac{K_f}{2} M_0^2 \sum_{s=1}^{r-1} \binom{r}{s} f_{\frac{1}{2}}^{s,r-s}, \quad (62)$$

donde $K_f = \epsilon \sqrt{\frac{6k_B T}{\rho}} \left(\frac{3}{4}\pi\rho\right)^{\frac{1}{6}}$ y $f_l^{x,y}$ es una función adicional empleada para remover las complejidades asociadas a la introducción del coeficiente de colisión $\beta_{i,j}^{free}$. Esta última función es definida como (Frenklach, 2002b),

$$f_l^{x,y} = \sum_{s=0}^{\infty} \binom{l}{s} \left(\mu_{l+x-s+\frac{1}{6}} \mu_{s+y-\frac{1}{2}} + \mu_{l+x-s-\frac{1}{2}} \mu_{s+y+\frac{1}{6}} + 2\mu_{l+x-s-\frac{1}{2}} \mu_{s+y-\frac{1}{6}} \right). \quad (63)$$

Nótese que para valores enteros de l , la Ec (63) puede evaluarse fácilmente. Sin embargo, las funciones que aparecen en la Ec. (61) y (62) son de orden $\frac{1}{2}$. Para estas funciones, la interpolación de Lagrange entre los logaritmos de las funciones de orden entero es empleada. Por lo tanto, en el régimen libre molecular, es necesario un esquema de interpolación adicional de la forma (Frenklach, 2002b),

$$\log \left(f_{1/2}^{x,y} \right) = L_{1/2} \left(\log \left(f_0^{x,y} \right), \log \left(f_1^{x,y} \right), \log \left(f_2^{x,y} \right) \right), \quad (64)$$

donde $L_{1/2}$ indica el polinomio de interpolación de Lagrange.

Y finalmente, en el régimen de transición, la coagulación está dada entre los límites de los dos regímenes discutidos anteriormente, el continuo y el libre molecular, $0.1 \leq k_n \leq 10$. Para determinar los términos fuente de coagulación en este caso, la media armónica de los valores de los términos fuente en los referidos límites es utilizada (Pratsinis, 1988),

$$G_r^t = \frac{G_r^f G_r^c}{G_r^f + G_r^c}. \quad (65)$$

3.3.3. Crecimiento superficial y Oxidación

El crecimiento superficial y la oxidación son modelados en este trabajo utilizando el mecanismo HACA (Frenklach & Wang, 1991). En este mecanismo, en base a los coeficientes mostrados en la Tabla 2, las tasas de reacción para el crecimiento superficial y la oxidación son calculadas usando ecuaciones de Arrhenius de la forma $k = AT^n \exp \left(\frac{-E}{RT} \right)$.

Tabla 2. Parámetros de la tasa de Arrhenius para el modelo MOMIC (Appel et al., 2000).

k_i	A_i $\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{s}^{-1}$	n_i	E_i kcal/mol
k_1	4.2×10^{13}	0.0	13.0
k_{-1}	3.9×10^{12}	0.0	11.0
k_2	1.0×10^{10}	0.734	1.43
k_{-2}	3.68×10^8	1.139	17.1
k_3	2.0×10^{13}	0.0	0.0
k_4	8.0×10^7	1.56	3.8
k_5	2.2×10^{12}	0.0	7.5
k_6	$\gamma_{OH} = 0.13$		

La tasa de crecimiento superficial del hollín debido a C_2H_2 y las tasas de oxidación debido a O_2 y OH son calculadas, respectivamente, como sigue (Frenklach, 2002b):

$$W_r^{C_2H_2} = k_4 [C_2H_2] \alpha \chi C_{soot} \circ \pi C_s^2 M_0 \sum_{l=0}^{r-1} \binom{r}{l} \mu_{l+\frac{2}{3}} (2)^{r-l}, \quad (66)$$

$$W_r^{O_2} = k_5 [O_2] \alpha \chi C_{soot} \circ \pi C_s^2 M_0 \sum_{l=0}^{r-1} \binom{r}{l} \mu_{l+\frac{2}{3}} (-2)^{r-l}, \quad (67)$$

$$W_r^{OH} = \gamma_{OH} [OH] \sqrt{\frac{\pi k_b T}{2 m_{oh}}} N_A C_s^2 M_0 \sum_{l=0}^{r-1} \binom{r}{l} \mu_{l+\frac{2}{3}} (-1)^{r-l}, \quad (68)$$

donde k_4 y k_5 son los coeficientes de velocidad cinética para las reacciones con C_2H_2 y O_2 , respectivamente. Además, $[C_2H_2]$, $[O_2]$ y $[OH]$ representan las concentraciones molares de las especies de gas, α es el factor estérico, γ_{OH} es la eficiencia de colisión para el radical OH , m_{oh} es la masa del radical OH , y C_s está representado por (Frenklach, 2002b),

$$C_s = \left(\frac{6m_c}{\pi\rho_s} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (69)$$

$\chi_{C_{soot}}^{\circ}$ es a su vez la densidad de número de radicales superficiales dada por (Appel et al., 2000),

$$\chi_{C_{soot}}^{\circ} = \chi_{C_{soot}} - H \frac{k_1[H] + k_2[OH]}{k_{-1}[H_2] + k_{-2}[H_2O] + k_3[H] + k_4[C_2H_2] + k_5[O_2]}, \quad (70)$$

donde $\chi_{C_{soot}} - H$ es la densidad de número nominal de radicales de hollín. El factor estérico α que aparece en las Ec. (66) y (67) es descrito por Appel et al. (2000) como un valor dependiente de la temperatura,

$$\alpha = \tanh\left(\frac{a}{\log \log(\mu_1)} + b\right), \quad (71)$$

donde a y b son parámetros de modelo ajustados para representar adecuadamente datos de referencia (Appel et al., 2000),

$$a = 12.65 - 0.00563T, \quad (72)$$

$$b = -1.38 + 0.00068T. \quad (73)$$

3.4. MÉTODO HÍBRIDO DE MOMENTOS (HMOM)

La desventaja del método MOMIC discutido en la Sección 3.3 es que este considera al hollín como partículas esféricas y que no es capaz de capturar la bimodalidad de la NDF. Para poder tratar la limitación relativa a las partículas esféricas, Mueller et al. (2009) plantearon una variación del método en la que los momentos son representados en función del área superficial y volumen del hollín, a diferencia de la formulación original que solo está en función de la masa. Para poder capturar la bimodalidad de la NDF Marchisio y Fox (2005) desarrollaron el método DQMOM (direct quadrature method of moments), en la que la NDF es aproximada a partir de una serie de funciones delta. Sin embargo, este último método requiere de la inversión de un sistema de ecuaciones lineal que en muchos casos puede estar mal condicionado. El método HMOM (Mueller et al., 2009b) combina la precisión del método DQMOM con la simplicidad del método MOMIC. Como ilustrado en la Figura 15, HMOM utiliza el enfoque de DQMOM para el primer modo (pequeñas partículas esféricas) y el enfoque de MOMIC para el segundo modo (grandes agregados fractales).

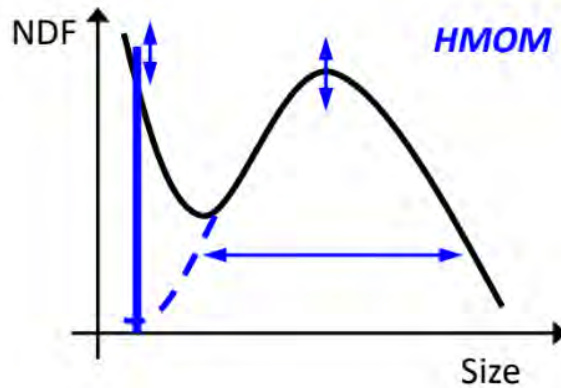


Figura 15. Función densidad de número de partículas de hollín para el método HMOM (Mueller, 2019)

Para incluir las cadenas de agregados, el modelo HMOM describe al hollín en función de su volumen V y de su área superficial S , donde el diámetro de una partícula primaria d_p y el número de partículas primarias en un agregado n_p están dados por (Mueller et al., 2009a),

$$d_p = 6VS^{-1}, \quad (74)$$

$$n_p = \frac{1}{36\pi} V^{-2} S^{-1}. \quad (75)$$

Con esta formulación, los momentos estadísticos de la NDF tienen dos índices, x para el orden del momento en volumen e y para el orden del momento en área superficial (Mueller et al., 2009a),

$$M_{x,y} = \sum_{i=0}^{\infty} V_i^x S_i^y N_i. \quad (76)$$

De esta forma, la ecuación de transporte para el x, y -ésimo momento estadístico está dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\frac{\partial M_{x,y}}{\partial t} + \frac{\partial u_j M_{x,y}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(0.55 \frac{\vartheta}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} M_{x,y} \right) + \dot{M}_{x,y}, \quad (77)$$

donde el primer término del lado derecho es la contribución de la termoforesis y $\dot{M}_{x,y}$ es el termino fuente que incluye la nucleación, condensación, coagulación,

crecimiento superficial y oxidación. Adicionalmente, una ecuación de transporte para el número de densidad N_0 (que representa el peso de la función delta para el DQMOM) es requerido,

$$\frac{\partial N_0}{\partial t} + \frac{\partial u_j N_0}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(0.55 \frac{\vartheta}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} N_0 \right) + \dot{N}_0, \quad (78)$$

donde \dot{N}_0 es el termino fuente que incluye la nucleación, condensación, coagulación, crecimiento superficial y oxidación. Al igual que en el método MOMIC, $\dot{M}_{x,y}$ depende de una gran cantidad de momentos de diferentes ordenes, por lo que es necesario una interpolación de Lagrange. Así, $M_{x,y}$ queda definido como (Mueller et al., 2009b),

$$M_{x,y}^{HMOM} = M_{x,y}^{DQMOM} + M_{x,y}^{MOMIC}. \quad (79)$$

Utilizando solamente 3 momentos, un polinomio de interpolación de primera orden de la forma (Mueller et al., 2009b),

$$M_{x,y}^{HMOM} = N_0 V_0^x S_0^y + N_L V_L^x S_0^y, \quad (80)$$

es obtenido, donde N_0 es el peso de la función delta, y la ubicación de la función delta (coordenadas S_0 y V_0) que representa el tamaño de la partícula nucleada es fija. Adicionalmente, N_L es la densidad de número de partículas grandes, V_L es el volumen medio de las partículas grandes y S_L es el área superficial media de las partículas grandes,

$$N_L = M_{0,0} - N_0, \quad (81)$$

$$V_L = M_{1,0} - N_0 V_0, \quad (82)$$

$$S_L = \frac{M_{0,1} - N_0 S_0}{N_L}. \quad (83)$$

Estos tres parámetros son obtenidos invirtiendo el sistema con tres momentos conocidos. Por lo tanto, los momentos transportados en este trabajo son 3, $M_{0,0}$ (densidad de número de partículas), $M_{1,0}$ (volumen total de hollín), $M_{0,1}$ (área superficial total de hollín). Junto con la ecuación de N_0 , estos momentos

representan un total de 4 ecuaciones de transporte a ser resueltas, en comparación con las 3 asociadas con el modelo MOMIC.

3.4.1. Nucleación

El modelo de nucleación utilizado en el HMOM es el propuesto por Blanquart y Pitsch (2009). En este modelo las primeras partículas de hollín son formadas a partir de la colisión de 2 dímeros de PAH. Así, el termino fuente de nucleación queda descrito como,

$$M_{x,y}^{nucl} = \frac{1}{2} \beta_N [DIMER]^2 V_0^x S_0^y, \quad (84)$$

donde $[DIMER]$ es la concentración molar de los dímeros de PAH y β_N es la tasa de colisión de dichos dímeros, la cual está dada por (Blanquart & Pitsch, 2009),

$$\beta_N = 2.2 \sqrt{\frac{16\pi kT}{m_D}} d_D^2, \quad (85)$$

donde m_D y d_D son la masa y el diámetro de los dímeros, respectivamente. Para poder obtener el valor de $[DIMER]$ es necesario determinar la tasa de dimerización $\dot{\omega}_{DIMER}$, la cual está definida por (Blanquart & Pitsch, 2009),

$$\dot{\omega}_{DIMER} = \gamma \sqrt{\frac{4\pi kT}{m_{PAH}}} \left(\frac{6m_{PAH}}{\pi\rho_s} \right)^2 [PAH]^2, \quad (86)$$

donde m_{PAH} es la masa del PAH, $[PAH]$ es la concentración molar de los PAH y γ es el coeficiente de adherencia (sticking coefficient) (el cual considera el hecho de que la tasa de formación de dímeros es mucho menor que aquella predicha por la teoría cinética de gases). Adicionalmente, es necesario calcular la tasa de colisión entre los dímeros y las partículas de hollín β_{C_i} ,

$$\beta_{C_i} = \sqrt{\frac{\pi kT}{2\mu_{D_i}}} (d_D + d_{C_i})^2 \quad (87)$$

donde μ_{D_i} es la masa reducida de un dímero y una partícula de hollín, y d_{C_i} es el diámetro de una partícula de hollín. Finalmente, la concentración de dímeros es obtenida a partir de la solución de una ecuación cuadrática (Blanquart & Pitsch, 2009),

$$\dot{\omega}_{DIMER} = \beta_N [DIMER]^2 + \sum_{i=0}^{\infty} \beta_{C_i} N_i [DIMER]. \quad (88)$$

El término fuente de nucleación para el peso de la función delta N_0 viene dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{N}_0^{nucl} = \frac{1}{2} \beta_N [DIMER]^2, \quad (89)$$

mientras que el área superficial y volumen de las partículas pequeñas de hollín son valores fijos definidos determinados a partir de,

$$V_0 = 2W_C \frac{C_{dimer}}{\rho_s} \quad (90)$$

$$S_0 = (36\pi)^{1/3} V_0^{2/3} \quad (91)$$

donde W_C es la masa molar del carbono y C_{dimer} es el número promedio de átomos de carbono por dímero.

3.4.2. Condensación de PAH

La condensación es el resultado de la colisión de una partícula de hollín con un dímero de PAH. El término fuente de condensación viene dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{M}_{x,y}^{cond} = \sum_{i=0}^{\infty} \beta_{C_i} \left(x \frac{\delta V}{V_i} + y \frac{\delta S}{S_i} \right) V_i^x S_i^y [DIMER] N_i, \quad (92)$$

donde δV y δS son las variaciones de volumen y superficie debido a la condensación,

$$\delta V = V_D = W_C C_{dimer} \rho_s, \quad (93)$$

$$\frac{\delta S}{S} = \frac{\delta V}{V} \left(\frac{2}{3} n_p^{-0.2043} \right). \quad (94)$$

Adicionalmente, el término fuente de condensación para el peso de la función delta N_0 viene dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{N}_0^{cond} = -\beta_{c_0} [DIMER] N_i. \quad (95)$$

3.4.3. Coagulación

La coagulación involucra la colisión de dos partículas de hollín. El termino fuente esta dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{M}_{x,y}^{coag} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^{\infty} \beta_{i,j} (V_{i+j}^x S_{i+j}^y - V_i^x S_i^y - V_j^x S_j^y) N_i N_j, \quad (96)$$

donde V_{i+j} y S_{i+j} son el volumen y el área superficial de la partícula resultante de la colisión de una partícula i con una partícula j . El volumen resultante es la suma de los dos volúmenes, mientras que el área superficial resultante depende del tipo de colisión (coalescencia o agregación). Según Mueller et al. (2009b), existen 3 tipos de colisión, (i) una partícula pequeña con otra pequeña, (ii) una partícula pequeña con una grande, y (iii) una partícula grande con otra grande. Para el primer caso, ambas partículas han sido creadas recientemente por lo que están en una fase semi líquida y al colisionar son fusionadas (coalescencia) formando una esfera con un área superficial igual a,

$$S_{0+0} = (36\pi)^{1/3} (V_0 + V_0)^{2/3} = (144\pi)^{1/3} V_0^{2/3}. \quad (97)$$

Segundo, en la colisión de una partícula pequeña con una grande, la partícula pequeña es adherida a la grande, de modo que esta última aumenta su tamaño manteniendo la forma esférica, como en el caso de la condensación y el crecimiento superficial. La nueva superficie es entonces calculada como,

$$S_{i+0} = S_i + \delta S. \quad (98)$$

Finalmente, en la colisión de una partícula grande con otra partícula grande, el resultado es pura agregación (forma cadena de agregados). La nueva superficie queda expresada como,

$$S_{i+j} = S_i + S_j. \quad (99)$$

Como descrito anteriormente, el régimen de coagulación depende del número de Knudsen k_n . Entonces, en el régimen libre molecular, la frecuencia de colisión es obtenida mediante,

$$\beta_{i,j} = K \left(\frac{1}{V_i} + \frac{1}{V_j} \right)^{1/2} (d_{c_i} + d_{c_j})^2, \quad (100)$$

donde la constante K esta dada por,

$$K = 2.2 \left(\frac{\pi k T}{2 \rho_s} \right)^{1/2}. \quad (101)$$

En este caso, el diámetro de colisión d_c sigue la siguiente forma,

$$d_c = d_p n_p^{1/D_f} = \frac{6}{(36\pi)^{1/D_f}} \frac{V^{1-2/D_f}}{S^{1-3/D_f}} \quad (102)$$

donde $D_f = 1.8$ es la dimensión fractal de las partículas de hollín.

En el régimen continuo, a su vez, la frecuencia de colisión está dada por,

$$\beta_{i,j} = \frac{2kT}{3\mu} \left(\frac{C_i}{d_{m_i}} + \frac{C_j}{d_{m_j}} \right) (d_{c_i} + d_{c_j}) \quad (103)$$

donde d_{m_i} es el diámetro de movilidad y C_i es el factor de corrección del deslizamiento Cunningham dado por,

$$C_i = 1 + 1.257 K n_{p_i}. \quad (104)$$

Finalmente, en el régimen transitorio, la frecuencia de colisión es obtenida al igual que en el método MOMIC, Ec.(65), es decir, mediante la media armónica de los valores caracterizando los regímenes límites.

Adicionalmente, el término fuente de coagulación para el número de partículas pequeñas viene dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{N}_0^{coag} = - \sum_{i=0}^{\infty} \beta_{i,0} N_i N_0, \quad (105)$$

mientras que el término fuente de coagulación es dividido en tres términos que implican los diferentes modos de colisión: colisión entre dos partículas pequeñas, colisión entre una partícula grande y una partícula pequeña, y colisión entre dos partículas grandes (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{M}_{x,y}^{coag} = \dot{M}_{x,y}^{coag \text{ SMALL-SMALL}} + \dot{M}_{x,y}^{coag \text{ SMALL-LARGE}} + \dot{M}_{x,y}^{coag \text{ LARGE-LARGE}} \quad (106)$$

$$\dot{M}_{x,y}^{coag \text{ SMALL-SMALL}} = \frac{1}{2} \beta_{0,0} (V_{0+0}^x S_{0+0}^y - 2V_0^x S_0^y) N_0^2 \quad (107)$$

$$\dot{M}_{x,y}^{coag \text{ SMALL-LARGE}} = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_{i,0} (V_{i+0}^x S_{i+0}^y - V_0^x S_0^y - V_i^x S_i^y) N_0 N_i \quad (108)$$

$$\dot{M}_{x,y}^{coag \text{ LARGE-LARGE}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \beta_{i,j} (V_{i+j}^x S_{i+j}^y - V_i^x S_i^y - V_j^x S_j^y) N_i N_j \quad (109)$$

3.4.4. Crecimiento superficial

En este modelo, el crecimiento superficial del hollín es el resultado de la adición de átomos de carbono en la superficie de una partícula de hollín debido al mecanismo HACA (Frenklach & Wang, 1991). Las tasas de reacción asociadas son calculadas usando las ecuaciones en forma de Arrhenius y utilizando los coeficientes mostrados en la Tabla 3.

En el modelo planteado por Blanquart y Pitsch (2009), es asumido que los sitios radicales en la superficie del hollín están en estado quasi estacionario y su concentración está expresada como,

$$C_{soot}^{\circ} = \frac{\gamma}{1 + \gamma} \quad (110)$$

$$\gamma = \frac{k_{1f}[H] + k_{2f}[OH] + k_{3f}}{k_{1b}[H_2] + k_{2b}[H_2O] + k_{3b}[H] + k_4[C_2H_2]}, \quad (111)$$

Tabla 3. Parámetros de la tasa de Arrhenius para el modelo HMOM (Blanquart & Pitsch, 2009).

k_i	A_i $\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{s}^{-1}$	n_i	E_i kcal/mol
k_{1f}	6.72×10	3.33	6.09
k_{1b}	6.44×10^{-1}	3.79	27.96
k_{2f}	1.0×10^8	1.80	68.42
k_{2b}	8.68×10^4	2.36	25.46
k_{3f}	1.13×10^{16}	-0.06	476.05
k_{3b}	4.17×10^{13}	0.15	0
k_4	2.52×10^9	1.10	17.13
k_5	2.2×10^{12}	0.0	31.38
k_6	$\gamma_{OH} = 0.13$		

De esta forma, el término fuente para el crecimiento superficial es determinado como,

$$\dot{M}_{x,y}^{sg} = \sum_{i,j=0}^{\infty} k_4 [C_2H_2] \chi (V_{i+j}^x S_{i+j}^y - V_i^x S_i^y - V_j^x S_j^y) N_i N_j, \quad (112)$$

donde χ es el número de sitios activos por unidad de área. Finalmente, el término fuente de crecimiento superficial para el número de partículas pequeñas es calculado de,

$$\dot{N}_0^{sg} = -k_4 \chi [C_2H_2] S_0 N_0. \quad (113)$$

3.4.5. Oxidación

La oxidación es la remoción de átomos de carbono de las partículas de hollín debido a la reacción superficial con oxígeno y radicales hidroxilos. En el modelo HMOM, las partículas pequeñas del primer modo desaparecen cuando son oxidadas, y las partículas más grandes del segundo modo reducen su tamaño. De esta forma, el término fuente de oxidación está dado por (Mueller et al., 2009b),

$$\dot{M}_{x,y}^{ox} = k_{ox}\chi \frac{\delta V}{V_0} V_0^x S_0^{y+1} N_0 - \sum_{i,j=0}^{\infty} k_{ox}\chi \left(x \frac{\delta V}{V_i} + y \frac{\delta S}{S_i} \right) V_i^x S_i^{y+1} N_i. \quad (114)$$

donde k_{ox} es obtenido a partir reacciones químicas presentes en la Tabla 3. Así, durante la oxidación, el número de partículas primarias en un agregado es constante, y el cambio en la superficie viene dado por,

$$\frac{\delta S}{S} = \frac{\delta V}{V} \frac{2}{3} \quad (115)$$

Finalmente, el término fuente de crecimiento superficial para el número de partículas pequeñas está dado por,

$$\dot{N}_0^{ox} = -k_{ox}\chi \frac{\delta V}{V_0} S_0 N_0 + k_{ox}\chi (S_0 + \delta S) N_1. \quad (116)$$

3.5. MÉTODO SECCIONAL DISCRETO (DSM)

En el modelo de formación de hollín seccional discreto (Netzell et al., 2007), la NDF es discretizada en un número finito de secciones n_{sec} , y, como mostrado en la Figura 16, para obtener la NDF final, una ecuación de transporte es resuelta para una de estas secciones.

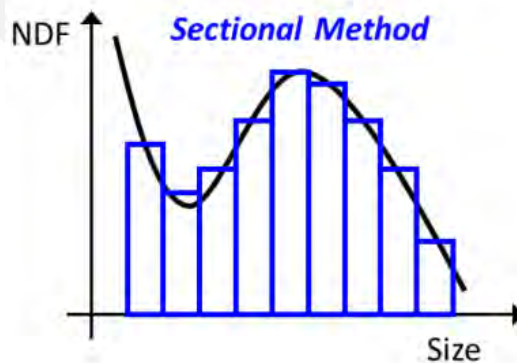


Figura 16. Función densidad de número de partículas hollín para el método DSM (M. Mueller, 2019).

En este caso, cada sección i representa un conjunto de partículas cuyo volumen está comprendido entre el volumen de la partícula más pequeña de hollín v_{min} y

el volumen de la partícula más grande v_{max} . El volumen mínimo v_{min} es igual al volumen equivalente en carbono del número de átomos de carbono de los precursores del hollín (PAH). Este volumen equivalente en carbono es definido para dos átomos de carbono como (Hoerlle & Pereira, 2019),

$$v_{C_2} = \frac{2MW_C}{N_A\rho_S}. \quad (117)$$

donde MW_C es el peso molecular del carbono. Para realizar la división del dominio expresado en términos de volumen de hollín, una distribución logarítmica es utilizada en este trabajo (Gelbard & Seinfeld, 1978).

$$v_i = v_{min} \left(\frac{v_{max}}{v_{min}} \right)^{\frac{i}{n_{bins}}}. \quad (118)$$

Dado que las secciones son continuas, el límite inferior de la sección i es el mismo que el límite superior de la sección $i - 1$. Entonces la sección i esta comprendida entre v_{i-1} y v_i . Además, una vez que la discretización de las secciones varía linealmente en escala logarítmica, puede suponerse un diámetro medio de partícula de la forma (Hoerlle & Pereira, 2019),

$$\bar{v}_i = \frac{v_i - v_{i-1}}{\ln(v_i) - \ln(v_{i-1})}. \quad (119)$$

Así, en el modelo DSM, la fracción volumétrica de hollín, la densidad de numero de partículas, y el número de partículas por unidad de volumen en cada sección i están dados por,

$$Q_i = \int_{v_{i-1}}^{v_i} q_i(v) dv, \quad (120)$$

$$n_i(v) = \frac{q_i(v)}{v}, \quad (121)$$

$$N_i = \int_{v_{i-1}}^{v_i} n_i(v) dv, \quad (122)$$

donde q_i es la densidad de fracción volumétrica de hollín, la cual es obtenida a partir de (Hoerlle & Pereira, 2019),

$$q_i(v) = \frac{Q_i}{v_i - v_{i-1}}. \quad (123)$$

En consecuencia, la fracción volumétrica total de hollín fv y el número de densidad total de partículas de hollín N_{total} están definidos como,

$$fv = \sum_{i=1}^{N_{sec}} Q_i, \quad (124)$$

$$N_{total} = \sum_{i=1}^{N_{sec}} N_i. \quad (125)$$

En cada sección, la variable a ser transportada es la fracción másica de hollín Y_i , la cual es expresada como $Y_i = \frac{\rho_s}{\rho} Q_i$. Según Colket and Hall (1994), la ecuación de transporte para cada sección está dada por,

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(0.55 \frac{\mu_{eff}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} Y_i \right) + \rho_s \dot{Q}_i \quad (126)$$

donde \dot{Q}_i es la tasa de producción/destrucción de hollín debido a la nucleación, condensación, coagulación, crecimiento superficial y oxidación.

3.5.1. Nucleación

La nucleación ocurre debido a la colisión de dos moléculas de PAH. Este proceso sólo añade volumen a la primera sección, por lo que el volumen de la primera partícula es igual al volumen de átomos de carbono presentes en dos precursores (PAH). El termino fuente de nucleación es modelado de esta forma como (Netzell et al., 2007),

$$\dot{Q}_{1,nuc} = 2 v_{PAH} \beta_{PAH} N_{PAH}^2, \quad (127)$$

donde v_{PAH} es el volumen del PAH, y N_{PAH} es la densidad de número de partículas de PAH. Además, β_{PAH} es la tasa de colisión de dos PAH, la cual está descrita como,

$$\beta_{PAH} = 4\sqrt{2} k_{fm} v_{PAH}^{1/6}, \quad (128)$$

donde $k_{fm} = 2.2 \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_B T}{\rho_s}\right)^{1/2}$.

3.5.2. Coagulación

En este modelo, los términos fuente de coagulación implican una integración directa de la ecuación de Smoluchowsky (1917) sobre todas las secciones. En particular, la Ec. (129) está descrita en el límite de coalescencia pura, es decir, no considera el fenómeno de agregación. El término fuente está descrito así por (Gelbard et al., 1980),

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{i,coag} = & \sum_{r=1}^{i-1} \sum_{p=1}^{i-1} \beta^1_{r,p,i} Q_r Q_p - Q_i \sum_{r=1}^{i-1} \beta^2_{r,i} Q_r - \frac{1}{2} \beta^3_{i,i} Q_i^2 \\ & - Q_i \sum_{r=i+1}^{n_{bins}} \beta^4_{r,i} Q_r, \end{aligned} \quad (129)$$

donde β^i son los coeficientes de frecuencia de colisión, los cuales son definidos como,

$$\beta^1_{r,p,i} = \int_{l=r-1}^r \int_{m=p-1}^p \frac{(l+m) \beta_{l,m}}{l m (v_r - v_{r-1})(v_p - v_{p-1})} dm dl, \quad (130)$$

$$\beta^2_{r,p,i} = \int_{l=v_{r-1}}^{v_r} \int_{m=v_{r-1}}^{v_i} \frac{(m-l) \beta_{l,m}}{l m (v_r - v_{r-1})(v_p - v_{p-1})} dm dl, \quad (131)$$

$$\beta^3_{r,p,i} = \int_{l=v_{r-1}}^{v_r} \int_{m=v_{r-1}}^{v_i} \frac{(l+m) \beta_{l,m}}{l m (v_r - v_{r-1})^2} dm dl, \quad (132)$$

$$\beta^4_{r,p,i} = \int_{l=v_{r-1}}^{v_r} \int_{m=v_{r-1}}^{v_i} \frac{m \beta_{l,m}}{l m (v_r - v_{r-1})(v_p - v_{p-1})} dm dl, \quad (133)$$

$\beta^1_{r,p,i}$ es válido para $2 \leq i \leq N_{sec}$; $r < i$; $p < i$,

$\beta^2_{r,i}$ es válido para $2 \leq i \leq N_{sec}$; $r \leq i$,

$\beta^3_{i,i}$ es válido para $1 \leq i \leq N_{sec}$,

$\beta_{r,i}^4$ es válido para $1 \leq i \leq N_{sec}$, $i < r$.

Adicionalmente, $\beta_{l,m}$ es la frecuencia de colisión entre las partículas i e j , la cual está definida en función del régimen de coagulación. Así, para el régimen libre molecular, esta frecuencia de colisión es expresada como,

$$\beta_{i,j} = k_{fm}(v_i^{1/3} + v_j^{1/3}) \left(\frac{1}{v_i} + \frac{1}{v_j} \right)^{1/2}, \quad (134)$$

mientras que para el régimen continuo, esta toma la forma,

$$\beta_{i,j} = k_c(v_i^{1/3} + v_j^{1/3}) \left(\frac{C_i}{v_i^{1/3}} + \frac{C_j}{v_j^{1/3}} \right). \quad (135)$$

Finalmente, al igual que en los modelos anteriores, en el régimen transitorio, la frecuencia de colisión es obtenida a partir de la media armónica de los valores caracterizando a los otros dos regímenes.

3.5.3. Crecimiento superficial y Oxidación

En este modelo, las reacciones superficiales ocurren también de acuerdo con el mecanismo HACA (Frenklach & Wang, 1991). Las tasas de reacción asociadas son así calculadas usando ecuaciones en forma de Arrhenius, donde los coeficientes son los mismos que los del modelo MOMIC (Tabla 2). A su vez, la tasa de crecimiento superficial está dada por (Netzell et al., 2007),

$$\Delta Q_{i,sg} = 2 v_c k_4 [C_2H_2] \alpha \chi_{C_{soot}^*} S_i, \quad (136)$$

donde $\chi_{C_{soot}^*}$ y α son calculados al igual que en el método MOMIC, Ec. (70) y (71). Además, S_i es la densidad superficial de las partículas de hollín, la cual es descrita como (Hoerlle & Pereira, 2019),

$$S_i = \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} \frac{Q_i}{v_i - v_{i-1}} \frac{3}{2} (v_i^{2/3} - v_{i-1}^{2/3}), \quad (137)$$

Finalmente, las tasas de oxidación están dadas por (Netzell et al., 2007),

$$\Delta Q_{i,O_2} = 2 m_c k_5 [O_2] \alpha \chi_{C_{soot}^*} S_i \quad (138)$$

$$\Delta Q_{i,OH} = m_C \gamma_{OH} [OH] \beta_{OH} S_i N_A, \quad (139)$$

donde m_C es la masa de carbono y β_{OH} es la frecuencia de colisión entre un radical hidroxilo y una partícula de hollín.

3.5.4. Dinámica interseccional

La formulación del término fuente de coagulación ya incorpora la dinámica interseccional requerida en el modelo DSM. Sin embargo, tanto la oxidación como el crecimiento superficial requieren una formulación especial para tratar esta dinámica. Esto ocurre debido a que cuando una partícula de hollín es oxidada esta reduce su volumen, pudiendo cambiar de sección a una inferior. El caso opuesto ocurre con el crecimiento superficial, en el que una partícula de hollín puede crecer tanto que cambia de sección a una superior. Para considerar esta dinámica interseccional, las siguientes ecuaciones son definidas (Hoerlle & Pereira, 2019),

$$\dot{Q}_{i,sg} = \Delta q_{i-1,sg}^{out} + \Delta q_{i,sg}^{in}, \quad (140)$$

$$\dot{Q}_{i,ox} = \Delta q_{i+1,ox}^{out} + \Delta q_{i,ox}^{in}, \quad (141)$$

donde Δq_i^{in} es el término fuente debido a las partículas que permanecen en la misma sección, y Δq_i^{out} es el término fuente de partículas que son trasladadas a una sección mayor o menor. Hoerlle (2019) define estos términos de la siguiente manera,

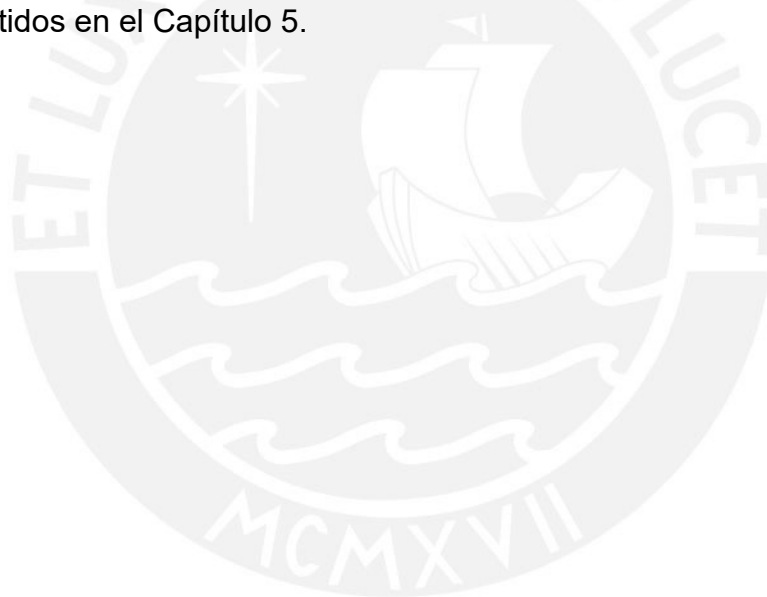
$$\Delta q_{i-1,sg}^{out} = \frac{\dot{Q}_{i,sg}}{1 - \frac{v_{i,max} - v_{i,min}}{v_{i+1,max} - v_{i+1,min}} \frac{\ln\left(\frac{v_{i+1,max}}{v_{i+1,min}}\right)}{\ln\left(\frac{v_{i,max}}{v_{i,min}}\right)}}, \quad (142)$$

$$\Delta q_{i,sg}^{in} = \frac{\dot{Q}_{i,sg}}{1 - \frac{v_{i+1,max} - v_{i+1,min}}{v_{i,max} - v_{i,min}} \frac{\ln\left(\frac{v_{i,max}}{v_{i,min}}\right)}{\ln\left(\frac{v_{i+1,max}}{v_{i+1,min}}\right)}}, \quad (143)$$

$$\Delta q_{i,ox}^{out} = \frac{\dot{Q}_{i,ox}}{1 - \frac{v_{i,max} - v_{i,min}}{v_{i-1,max} - v_{i-1,min}} \frac{\ln\left(\frac{v_{i-1,max}}{v_{i-1,min}}\right)}{\ln\left(\frac{v_{i,max}}{v_{i,min}}\right)}}, \quad (144)$$

$$\Delta q_{i,ox}^{ins} = \frac{\dot{Q}_{i,ox}}{1 - \frac{v_{i-1,max} - v_{i-1,min}}{v_{i,max} - v_{i,min}} \frac{\ln\left(\frac{v_{i,max}}{v_{i,min}}\right)}{\ln\left(\frac{v_{i-1,max}}{v_{i-1,min}}\right)}}. \quad (145)$$

Finalmente, es importante resaltar que los modelos de formación de hollín discutidos en este capítulo han sido implementados en una herramienta computacional Capítulo 4 y los resultados obtenidos con los referidos modelos son discutidos en el Capítulo 5.



Capítulo 4 MODELAMIENTO NUMÉRICO

En este capítulo la herramienta computacional utilizada en este trabajo es descrita en detalle. En particular, la metodología utilizada para la generación de nuevos solvers, y para la implementación de los modelos de hollín en estos solvers, es resaltada. Adicionalmente, las configuraciones geométricas empleadas en las simulaciones numéricas realizadas usando los modelos de hollín son discutidas. Finalmente, las técnicas de generación de malla, las condiciones de contorno, condiciones iniciales y esquemas numéricos utilizados durante las referidas simulaciones son también abordadas en este capítulo.

4.1. HERRAMIENTA COMPUTACIONAL

OpenFoam es una herramienta computacional de CFD de código abierto, la cual fue creada por Henry Weller (1998). Actualmente es propiedad de OpenFOAM Foundation y es distribuida exclusivamente bajo la licencia pública GNU. Este paquete de CFD utiliza C++ como lenguaje de programación y cuenta con una gran librería de “solvers” capaces de lidiar con diversos problemas de ingeniería, incluidos aquellos involucrando dinámica de fluidos. Entre los problemas que pueden ser tratados con OpenFoam están aquellos involucrando transferencia de calor, reacción química, rastreo de partículas, dinámica molecular, electromagnetismo, análisis de esfuerzo, etc. Referente a flujo de fluidos, OpenFoam es capaz de resolver flujos compresibles, incompresibles, laminares, turbulentos, multifásicos, etc. Adicionalmente, este software cuenta con diversas herramientas incluyendo aquellas relativas a la generación de malla de geometrías complejas, el procesamiento de datos, y la visualización de resultados. Actualmente esta herramienta no cuenta con una interfaz gráfica, por lo que el usuario debe ejecutar cada instrucción usando línea de comando en el terminal del sistema operativo (OS) utilizado. OpenFOAM está disponible para Windows, Linux y macOS. La estructura general de OpenFOAM es mostrada en la Figura 17.

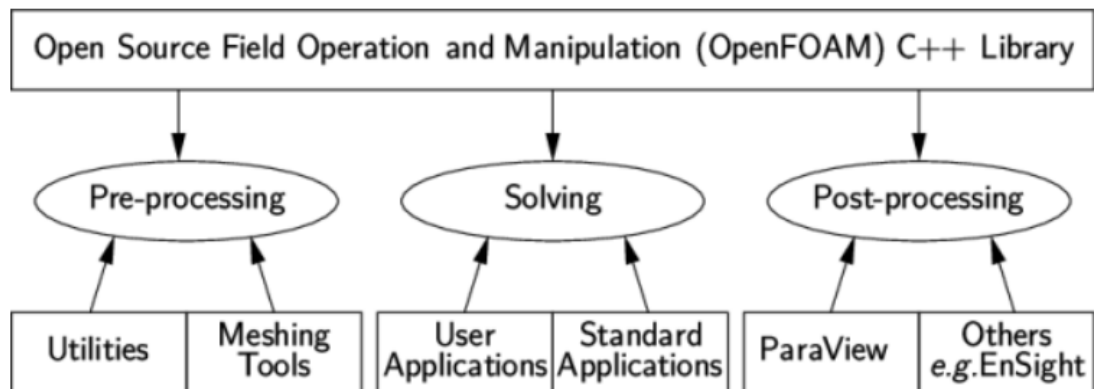


Figura 17. Estructura general de OpenFOAM (CFD direct, 2022)

En este trabajo, para el preprocesamiento, herramientas incluidas dentro de OpenFOAM como el *blockMesh* y *snappyHexMesh* fueron utilizadas. Estas herramientas serán descritas más adelante en este capítulo. Para el postprocesamiento y visualización de los resultados obtenidos, a su vez, el software Paraview (Henderson, 2007), acoplado con OpenFOAM fue utilizado.

4.1.1. Estructura de solvers

Los solvers en OpenFOAM son organizados siguiendo el ordenamiento estándar mostrado en la Figura 18. El código fuente de cada solver es incluido en un directorio cuyo nombre es el de la aplicación en cuestión. El archivo fuente principal lleva el nombre del solver con la extensión .C. En el caso de la Figura 18, el solver lleva el nombre de newApp, por tanto el directorio lleva el mismo nombre y el archivo fuente principal es newApp.C.

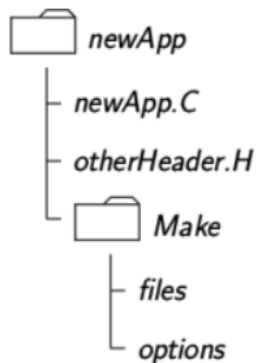


Figura 18. Estructura de un solver en OpenFOAM (CFD direct, 2022).

El directorio *Make* mostrado en la Figura 18 contiene las instrucciones de compilación del solver. El archivo *files* nombra todos los archivos fuente (.C), especifica el nombre de la nueva aplicación y la ubicación del archivo de salida. Mientras que el archivo *options* especifica los directorios que contienen los archivos “*include*” y las librerías que utilizará el nuevo solver. Por ejemplo, en el solver del método HMOM denominado FPVHMOM, el archivo *make/files* es de la forma:

```

1 HMOM.C
2 FPVHMOM.C
3
4 EXE = $(FOAM_USER_APPBIN) /FPVHMOM
  
```

En este caso el código fuente principal del solver es FPVHMOM.C. HMOM.C es otro archivo fuente creado para esta aplicación, el cual, más específicamente, crea una clase denominada *hmom*. La ubicación del solver es *FOAM_USER_APPBIN*.

A su vez, el archivo *make/options* es de la forma:

```

1 EXE_INC = \
2   -I$(LIB_FPVFoamV1912_SRC)/TurbulenceModels/turbulenceModels/lnInclude \
3   -I$(LIB_FPVFoamV1912_SRC)/TurbulenceModels/compressible/lnInclude \
4   -I$(LIB_SRC)/thermophysicalModels/specie/lnInclude \
5   -I$(LIB_FPVFoamV1912_SRC)/thermophysicalModels/reactionThermo/lnInclude
6 \
7   -I$(LIB_SRC)/transportModels/compressible/lnInclude \
8   -I$(LIB_FPVFoamV1912_SRC)/thermophysicalModels/basic/lnInclude \
9   -I$(LIB_SRC)/thermophysicalModels/chemistryModel/lnInclude \
  
```

```

10 -I$(LIB_SRC)/ODE/lnInclude \
11 -I$(LIB_FPVFoamV1912_SRC)/combustionModels/lnInclude \
12 -I$(LIB_SRC)/finiteVolume/lnInclude \
13 -I$(LIB_SRC)/finiteVolume/cfdTools \
14 -I$(LIB_SRC)/meshTools/lnInclude \
15 -I$(LIB_SRC)/sampling/lnInclude \
16 -I$(LIB_SRC)/dynamicFvMesh/lnInclude
17
18 EXE_LIBS = \
19 -L$(FOAM_USER_LIBBIN) \
20 -lcompressibleTransportModels \
21 -lFPVFoamfluidThermophysicalModels \
22 -lspecie \
23 -lchemistryModel \
24 -lODE \
25 -lFPVFoamcombustionModels \
26 -lFPVFoamreactionThermophysicalModels \
27 -lFPVFoamturbulenceModels \
28 -lFPVFoamcompressibleTurbulenceModels \
29 -lfiniteVolume \
30 -ldynamicFvMesh \
31 -ltopoChangerFvMesh \
32 -lmeshTools \
33 -lsampling \
    -lfvOptions

```

En este caso, el EXE_INC indica los “*header files*” a ser incluidos por el nuevo solver con su respectiva ubicación, mientras que el EXE_LIBS los “*library files*” que deben ser cargados durante el proceso de compilación *wmake*. Note que, en este caso particular, todos los archivos cargados son los necesarios para el solver del modelo HMOM.

Finalmente, es importante notar que OpenFOAM utiliza su propio script de compilación llamado *wmake*, el cual está basado en *make*, pero es considerablemente más versátil y fácil de usar. Por ejemplo, en la Figura 19, el solver “*newApp*” es mostrado, el cual incluye un “*header file*” llamado *nc.H*, que puede ser compilado independientemente del código fuente del solver en un archivo binario ejecutable con extensión *.so* y almacenado en una biblioteca de objetos compartidos. Así, cuando un fragmento de código es compilado, por ejemplo, *newApp.C*, que utiliza la clase *nc*, no es necesario recompilar *nc.C*, sino que *newApp.C* llama a la biblioteca *nc.so*.

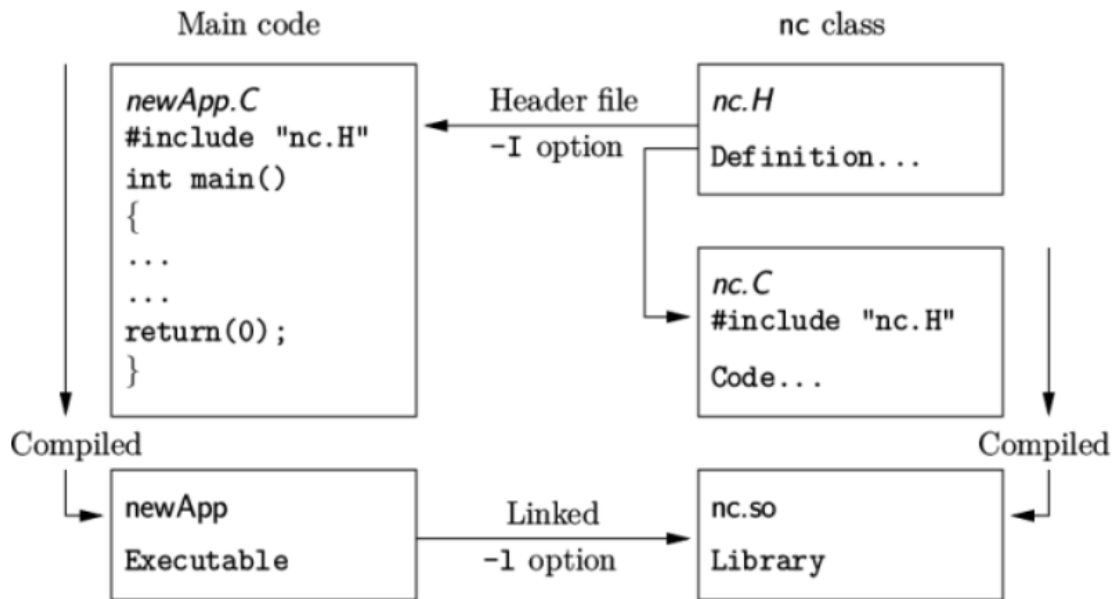


Figura 19. Esquema de compilación de solvers en OpenFOAM (CFD direct, 2022).

4.1.2. High level language

Las ecuaciones de transporte usadas para describir flujos de fluidos involucran ecuaciones diferenciales parciales en 3 dimensiones de espacio y tiempo. Estas ecuaciones involucran el uso de varios conceptos incluyendo escalares, vectores, tensores, álgebra tensorial, cálculo tensorial y análisis dimensional. En CFD, la solución de estas ecuaciones de transporte implica el uso de procedimientos de discretización, manipulación de sistemas matriciales y algoritmos de solución.

OpenFOAM, al estar basado en programación orientada a objetos en C++, incluye diversas clases, las cuales declaran tipos y realizan operaciones asociadas con los diferentes conceptos matemáticos presentes en CFD. Este conjunto de métodos y clases proporcionadas por OpenFOAM es denominada "high level language", el cual posee una sintaxis similar a la utilizada en las matemáticas escritas, utilizando funciones descriptivas u operadores simbólicos. Por ejemplo, en la Tabla 4, algunas funciones asociadas con operaciones

diferenciales de las clases *fvm* (finite volume method) y *fv* (finite volume calculus) son mostradas.

Tabla 4. Operadores diferenciales de las clases *fvm* y *fv*.

Descripción	Expresión	
	Matemática	Expresión en OpenFOAM
Laplaciano	$\nabla^2 U, \nabla \cdot \mu \nabla U$	laplacian(U), laplacian(mu,U)
Derivación Temporal	$\frac{\partial U}{\partial t}, \frac{\partial \rho U}{\partial t}$	ddt(U), ddt(rho,U)
Convección	$\nabla \cdot \varphi U$	div(phi,U)
Gradiente	∇U	Grad(U)

A modo de ilustración, también, dentro del solver *icoFoam* aparece la Ec. (146), la cual representa las ecuaciones de Navier-Stokes para un caso incompresible, y la cual es resuelta usando un algoritmo de solución tipo PISO (Issa et al., 1986). En esta ecuación, φ hace referencia al flujo de velocidad para una densidad constante.

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \varphi \vec{U} - \nabla \cdot \mu \nabla \vec{U} = -\nabla p. \quad (146)$$

Así, usando el *high level language*, la Ec. (146) es escrita en OpenFOAM como:

```

1 solve
2 (
3 fvm::ddt(rho, U)
4 + fvm::div(phi, U)
5 - fvm::laplacian(mu, U)
6 ==
7 - fvc::grad(p)
8 )

```

4.1.3. Manipulación de datos en OpenFOAM

OpenFOAM representa escalares, vectores y matrices como campos tensoriales. Específicamente, un tensor de rango 0 es un escalar, un tensor de rango 1 es un vector y un tensor de rango 2 es una matriz. En la Tabla 5, las clases predefinidas para los tensores son mostradas

Tabla 5. Clases predefinidas para tensores de rango 0 a 2.

Rango de Tensor	Clase	Función de acceso
0	scalar	
1	vector	x(), y(), z() xx(), xy(), xz(),yy(), yz(),
2	tensor	zz()

Existen diversas clases de tensores en OpenFOAM, por ejemplo, vector, *symmTensorField*, *sphericalTensorField*, etc. Todas estas clases están descritas en detalle en la guía de usuario (CFD direct, 2022). Todos los tensores están unidos a una unidad dimensional y OpenFOAM realiza una comprobación dimensional de cualquier operación tensorial que sea realizada. Las unidades están definidas en función de un vector de 7 elementos, donde cada elemento representa una unidad de acuerdo con la Tabla 6.

Tabla 6. Unidades dimensionales en OpenFOAM

No.	Propiedad	Unidad	Simbolo
1	Masa	kilogramo	kg
2	Longitud	metro	m
3	Tiempo	segundo	s
4	Temperatura	Kelvin	K
5	Cantidad	moles	mol
6	Corriente	ampere	A
7	Intensidad Luminosa	candela	cd

Las variables son entonces definidas como,

```

1 volScalarField dNSootdt
2 (
3     IOobject
4     (
5         "dNSootdt",
6         runTime.timeName(),
7         mesh,
8         IOobject::NO_READ,
9         IOobject::AUTO_WRITE
10    ),
11    mesh,

```

```
12     dimensionedScalar("dNSootdt", dimensionSet(0,-3,-1,0,0,0,0), 0.0)
13 );
```

En este caso, *volScalarField* hace referencia a la clase del tensor, *dNSootdt* es el nombre de la variable del término fuente en el modelo de hollín de 2 ecuaciones. *dimensionSet(0,-3,-1,0,0,0,0)* es a su vez la clase que asigna las unidades a la variable, en este caso $\frac{1}{m^3s}$ (haciendo referencia a la densidad de número de partículas). Note también que las líneas 3 a la 10 incluyen las instrucciones para la asignación e inicialización de la variable en la malla computacional utilizada.

4.1.4. Solvers de combustión

En este trabajo, dos solvers de combustión fueron utilizados. El primero es denominado *FlameletSimpleFoam*, el cual fue desarrollado por Cuoci et al. (2010) y adaptado a versiones más actuales de OpenFOAM por Tobias Holzmann (2012). El segundo solver es denominado *FPVFoam*, el cual fue desarrollado por el equipo NanyangCFD (Xian, 2019), basado en el solver *flameletFoam* (Muller et al., 2013).

4.1.4.1. FlameletSimpleFoam

Este solver de combustión está basado en la teoría de SLF descrito en la Sección 2.3.1, y está implementado en un contexto de simulaciones RANS en estado estacionario, mediante el uso del algoritmo SIMPLE (Patankar & Spalding, 1972). La librería de flamelets requerida por el solver es construida en un paso de preprocesamiento, utilizando cuatro variables independientes: (i) la fracción de mezcla, (ii) su varianza, (iii) la tasa de disipación escalar y (iv) el defecto de entalpía. Estos flamelets son generados resolviendo las ecuaciones que describen llamas de difusión laminares en estado estacionario de tipo “*counterflow*”. Este solver cuenta con una librería denominada *libOpenSmoke*(Cuoci, 2010), la cual contiene tres utilidades principales requeridas por el solver para realizar simulaciones numéricas de llamas turbulentas difusivas. (i) La primera utilidad es utilizada para preprocesar los

mecanismos cinéticos en formato CHEMKIN, (ii) la segunda utilidad es usada para generar los flamelets utilizando la cinética química detallada, y (iii) la tercera utilidad es empleada para generar las tablas que son utilizadas por el solver principal. Los flamelets generados cubren una amplia gama de tasas de disipación escalar, desde el equilibrio hasta la extinción. Para tener en cuenta los efectos de la turbulencia en los perfiles laminares de los flamelets, un enfoque tipo función de densidad de probabilidad (PDF) presumida es empleado. Así, en este solver de combustión, la fracción media de la mezcla, la varianza de la fracción de la mezcla y la entalpía media son resueltas mediante ecuaciones de transporte. A su vez, el campo de disipación escalar es estimado a partir del campo de turbulencia y la varianza de la fracción de mezcla.

Parte del código fuente principal de este solver es mostrado a continuación,

```
1  while (simple.loop(runTime))
2  {
3      Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
4
5      // Pressure-velocity SIMPLE corrector
6      #include "UEqn.H"
7      #include "ZEqn.H"
8      #include "HEqn.H"
9
10     if (simple.consistent())
11     {
12         #include "pcEqn.H"
13     }
14     else
15     {
16         #include "pEqn.H"
17     }
18
19
20     turbulence->correct();
21
22     runTime.write();
23
24     Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
25     << "   ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
26     << nl << endl;
27 }
28
```

donde, en la línea 7, las Ec.(22), (26) y (27) son incluidas en el solver mediante el archivo *ZEqn.H*.

Finalmente, en el extracto de código indicado a continuación,

```

1 //- Solving equation of variance of mixture fraction
2 fvScalarMatrix ZEqn
3 (
4   fvm::div(phi, Z)
5   - fvm::laplacian(turbulence->muEff()/sigmat, Z)
6 );
7
8 ZEqn.relax();
9
10 ZEqn.solve("Z");
11
12 if (varianceEquation == false)
13 {
14   //- Solving equation of variance of mixture fraction
15   fvScalarMatrix ZvarEqn
16   (
17     (
18       fvm::div(phi, Zvar)
19       - fvm::laplacian(turbulence->mut()/sigmat, Zvar)
20       - Cg*turbulence->mut()*magSqr(fvc::grad(Z))
21       + Cd*rho*turbulence->epsilon()/(turbulence->k()+k_small)*Zvar
22     )
23   );
24
25   ZvarEqn.relax();
26
27   ZvarEqn.solve("Zvar");
28 }
29 else
30 {
31   Info << "Algebraic equation for Zvar" << endl;
32
33   scalarField& ZvarCells = Zvar.ref();
34
35   ZvarCells =
36     Cg*turbulence->mut()*magSqr(fvc::grad(Z))*turbulence->k()
37     / (Cd*rho*(turbulence->epsilon()+epsilon_small));
38 }
39
40 //- Updating stoichiometric dissipation rate
41 chi_st=Cx*turbulence->epsilon()/(turbulence->k()+k_small)*Zvar;

```

la varianza de la fracción de la mezcla, Ec. (26), está incluida entre las líneas 2 y 6, la Ec. (27) entre las líneas 15 y 23, y la Ec. (22) es mostrada en la última línea de este. Cabe resaltar que solver tiene la opción para resolver la ecuación

de la varianza de la fracción de mezcla de manera algebraica (en lugar de resolver la ecuación de transporte).

4.1.4.2. FPVFoam

Para describir problemas de combustión turbulenta no premezclada, este solver de combustión utiliza el enfoque FPV descrito en la Sección 2.3.2. El código está basado en el algoritmo PIMPLE, el cual es una combinación del algoritmo PISO (Issa et al., 1986) y el algoritmo SIMPLE (Patankar & Spalding, 1972). El solver es usado para casos compresibles y funciona tanto para LES como para RANS. El algoritmo general del solver *FPVFoam* es mostrado en la Figura 20.

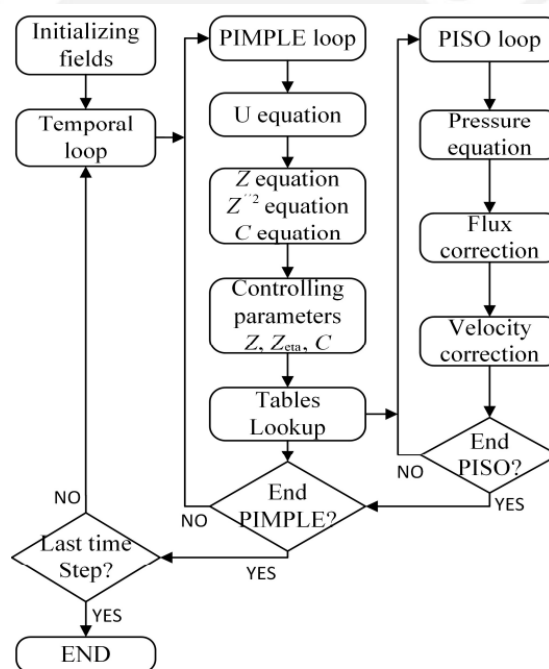


Figura 20. Diagrama de flujo del solver *FPVFoam* (Manrique et al., 2021).

En este solver, la librería de flamelets es calculada para una llama laminar de difusión tipo “*counterflow*” mediante el uso del software *FlameMaster* (Pitsch, 2007). Dentro de las utilidades del solver *FPVFoam*, existe una herramienta que lee los archivos generados por *FlameMaster*, integra los flamelets con una beta-PDF y organiza los datos en tablas para poder ser utilizados por el solver

principal. El solver principal resuelve tres ecuaciones de transporte adicionales a las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento.

Una parte del código fuente principal de este solver de combustión es mostrado a continuación,

```
1  while (pimple.loop())
2      {
3
4
5          #include "UEqn.H"
6          #include "PvEqn.H"
7          #include "ZEqn.H"
8          #include "varZEqn.H"
9
10
11         // --- Pressure corrector loop
12         while (pimple.correct())
13             {
14                 if (pimple.consistent())
15                     {
16                         #include "pcEqn.H"
17                     }
18                 else
19                     {
20                         #include "pEqn.H"
21                     }
22             }
23
24             turbulence->correct();
25
26             rho = thermo.rho();
27         }
28
29         runTime.write();
30
31         runTime.printExecutionTime(Info);
32
33     }
```

donde, entre las líneas 6 y 8, tres archivos tipo *header* son incluidos.

Más específicamente, primero, *PvEqn.H* hace referencia a la ecuación de transporte para la variable de progreso indicada en la Ec. (32),

```
1      fvScalarMatrix PvEqn
2      (
3          (
4              fvm::ddt(rho, Chi)
```

```

5          + fvm::div(phi, Chi)
6      - fvm::laplacian(turbulence->DZEff(), Chi)
7          - thermo.Srr()
8      )
9      );
10
11
12      PvEqn.relax();
13      fvOptions.constrain(PvEqn);
14      PvEqn.solve();
15      bound(Chi, 0.0);
16
17
18      Info<< "-----> Chi min/max = " << min(Chi).value() << ", "
19      << max(Chi).value() << endl;

```

Segundo, *ZEqn.H* hace referencia a la ecuación de transporte para la fracción de mezcla media indicada en la Ec. (30),

```

1      fvScalarMatrix ZEqn
2      (
3          (
4              fvm::ddt(rho, Zmix)
5              + fvm::div(phi, Zmix)
6              - fvm::laplacian(turbulence->DZEff(), Zmix)
7          )
8      );
9
10     ZEqn.relax();
11     fvOptions.constrain(ZEqn);
12     ZEqn.solve();
13     bound(Zmix, 0.0);
14
15     Info<< "-----> Zmix min/max = " << min(Zmix).value() << ", "
16     << max(Zmix).value() << endl;

```

Y, tercero, *varZEqn.H* hace referencia a la ecuación de transporte para la varianza de la fracción de mezcla indicada en la Ec. (31),

```

1      fvScalarMatrix varZEqn
2      (
3          (
4              fvm::ddt(rho, varZ)
5              + fvm::div(phi, varZ)
6              - fvm::laplacian(turbulence->DZEff(), varZ)
7              - 2.0*turbulence->Production()*magSqr(fvc::grad(Zmix))
8              + turbulence->Destruction()*varZ
9          )
10     );
11
12     varZEqn.relax();

```



```

13     fvOptions.constrain(varZEqn);
14     varZEqn.solve();
15     //fvOptions.correct(varZ);
16     bound(varZ, 0.0);
17
18     Info<< "-----> varZ min/max = " << min(varZ).value() << ", "
19         << max(varZ).value() << endl;

```

4.1.5. Implementación de modelos de hollín

En todos los solvers de OpenFOAM existe un archivo denominado *createFields.H*, en el cual las variables o campos utilizados por el solver son declarados. En este archivo, las diferentes variables y campos utilizados por los modelos de hollín implementados en este trabajo han sido añadidos. Por ejemplo, parte del archivo *createFields.H* del solver del modelo HMOM es mostrado a seguir,

```

1 volScalarField  M00
2 (
3     IOobject
4     (
5         "M00",
6         runTime.timeName(),
7         mesh,
8         IOobject::NO_READ,
9         IOobject::AUTO_WRITE
10    ),
11    mesh
12 );
13 );
14 volScalarField  M10
15 (
16     IOobject
17     (
18         "M10",
19         runTime.timeName(),
20         mesh,
21         IOobject::NO_READ,
22         IOobject::AUTO_WRITE
23    ),
24    mesh
25 );
26
27 volScalarField  M01
28 (
29     IOobject
30     (
31         "M01",

```

```

32     runtime.timeName(),
33     mesh,
34     IOobject::NO_READ,
35     IOobject::AUTO_WRITE
36 ),
37 mesh
38 );
39
40 volScalarField NO
41 (
42     IOobject
43     (
44         "NO",
45         runtime.timeName(),
46         mesh,
47         IOobject::NO_READ,
48         IOobject::AUTO_WRITE
49     ),
50     mesh
51 );

```

donde los 4 escalares (M00, M10, M01, N0) transportados, Ec. (77) y (78) son declarados. Nótese que, en las 4 variables, la opción de auto escritura es seleccionada. Esto último permite que cada vez que el solver escriba resultados, un archivo con el nombre de la variable (escalar transportado) sea creado.

Los 4 modelos de hollín descritos en el Capítulo 3 han sido implementados en ambos solvers de combustión, *FPVFoam* y *FlameletSimpleFoam*. En particular, las ecuaciones de transporte asociadas a cada modelo de hollín han sido añadidas en forma de “*headers*” y colocadas junto a las ecuaciones de transporte de los modelos de combustión.

4.1.5.1. Implementación del modelo de 2 ecuaciones

La implementación de este modelo semi-empírico fue basada en el trabajo realizado por Zhang (2019), utilizando las mismas constantes empíricas e incluyéndolas dentro del archivo *createFields.H*, como indicado a continuación,

```

1     scalar Sct = 1;
2     scalar Mwc = 144;
3     scalar wPrec = 26;
4     scalar rhoS = 1800;
5     scalar Ca = 54;
6     scalar Ta = 21100;

```

```

7     scalar Cb = 1;
8     scalar Cgg = 11700;
9     scalar Tg = 12100;
10    scalar Cw1 = 105.81;
11    scalar CollEff = 0.04;
12    scalar Cw2 = 8903.51;
13    scalar Tw2 = 19778;
14    scalar NA = 6.02214e+26;
15    scalar Nnorm = 1.0e+15;
16    scalar kb = 1.3806488e-23;
17    scalar wC2H2=26.03824;
18    scalar wCO2=44.009;
19    scalar wCO=28.01;
20    scalar wCH4=16.04;
21    scalar wOH=17.00737;
22    scalar wO2=31.9988;
23    scalar wH2O=18.01528;

```

Además, las Ec. (41) y (42) fueron incluidas como ecuaciones de transporte dentro del archivo *twoEquationEqn.H*,

```

1 surfaceScalarField gradTf =
2 fvc::interpolate(fvc::grad(T)*0.55*AT*rho*turbulence->DZEff()/T) &
3 mesh.Sf();
4
5 fvScalarMatrix PDSootEqn
6 (
7     fvm::ddt(rho, PDSoot) +
8     fvm::div(phi, PDSoot)
9     - fvm::div(gradTf, PDSoot)
10
11     ==
12     dNSootdt/(Nnorm)
13
14 );
15 PDSootEqn.relax();
16 solve(PDSootEqn);
17
18
19 fvScalarMatrix sootEqn
20 (
21     fvm::ddt(rho, soot) +
22     fvm::div(phi, soot)
23     - fvm::div(gradTf, soot)
24     ==
25     dMSootdt
26
27 );
28 sootEqn.relax();
29 solve(sootEqn);

```

entre las líneas 5 y 14, y entre las líneas 19 y 27, respectivamente. Nótese que la velocidad termoforética fue implementada dentro del código en las líneas 1, 2 y 3. Finalmente, la formulación de los términos fuente $dNSootdt$ y $dMSootdt$ está incluida dentro de un archivo adicional llamado *twoEquation.H*, el cual es mostrado en el Apéndice B.

4.1.5.2. Implementación del modelo MOMIC

Para la implementación de este modelo, una clase llamada *momic.C* fue creada. En los atributos de esta clase, todas las variables, constantes y parámetros empleados para el desarrollo del modelo fueron incluidos. Además, todas las ecuaciones descritas en la Sección 3.3 han sido implementadas en forma de métodos dentro de esta clase *momic.C*. Por ejemplo, el término fuente de nucleación *MOMIC::NucSource()*, descrito en forma vectorial, haciendo referencia a cada uno de los momentos a transportar, es mostrado a continuación,

```
1 void MOMIC::NucSource()
2 {
3
4     double CNuc = vDW*std::sqrt(4.0*M_PI*kB*T/(mC*NC_PAH))
5     *dPAH*Navogad*dPAH*Navogad/normParameter;
6
7     source_nucleation[0] =
8     *gammaNuc*CNuc*std::pow(molar_concentration(Y_PAH,MW_PAH),2.0);
9     source_nucleation[1] = 2.0*NC_PAH*source_nucleation[0];
10    source_nucleation[2] = 2.0*NC_PAH*source_nucleation[1];
11
12 }
```

Para poder trabajar con diferentes especies precursoras de hollín, el método *MOMIC::SetPAH_constants()* fue incluido en la implementación del modelo MOMIC,

```
1 void MOMIC::SetPAH_constants()
2     {
3     if (pah_species == "C16H10")
4         {
5             NC_PAH= NPyr;
6             dPAH= dPyr;
7             gammaNuc= gammaPyr;
8             MW_PAH=pyrMW;
```

```

9          }
10         else if (pah_species == "C6H6")
11         {
12             NC_PAH= NBenzene;
13             dPAH= dBenzene;
14             gammaNuc= gammaBenzene;
15             MW_PAH=benzeneMW;
16         }
17         else if (pah_species == "C10H8")
18         {
19             NC_PAH= NNaph;
20             dPAH= dNaph;
21             gammaNuc= gammaNaph;
22             MW_PAH=naphMW;
23         }
24     }
25 }

```

el cual permite utilizar al benceno, naftaleno y/o pireno como especies precursoras de hollín. Los métodos de la clase *momic.C* usados para determinar los términos fuente restantes de este modelo de hollín son mostrados en el Apéndice C.

Finalmente, nótese que, tal como indicado a seguir, las ecuaciones de transporte para los momentos M0, M1 y M2 caracterizando este modelo de hollín, Ec.(52), han sido implementadas en un archivo adicional denominado *momentTransport.H*,

```

1 surfaceScalarField gradTf = fvc::interpolate
2 (fvc::grad(T)*0.55*AT*rho*turbModel.muEff()/T) & mesh.Sf();
3
4 fvScalarMatrix M0Eqn
5 (
6     fvm::ddt(rho, M0) +
7     fvm::div(phi, M0)
8     - fvm::div(gradTf, M0)
9     ==
10    M0source
11 );
12     M0Eqn.relax();
13     solve(M0Eqn);
14
15
16 fvScalarMatrix M1Eqn
17 (
18     fvm::ddt(rho, M1) +
19     fvm::div(phi, M1)
20     - fvm::div(gradTf, M1)

```

```

21     ==
22     M1source
23 );
24     M1Eqn.relax();
25     solve(M1Eqn);
26
27
28 fvScalarMatrix M2Eqn
29 (
30     fvm::ddt(rho, M2) +
31     fvm::div(phi, M2)
32     - fvm::div(gradTf, M2)
33     ==
34     M2source
35 );
36     M2Eqn.relax();
37     solve(M2Eqn);

```

4.1.5.3. Implementación del modelo HMOM

Al igual que en el modelo MOMIC, una clase adicional fue creada para este modelo HMOM. Específicamente, la clase *hmom.C* incluye todas las ecuaciones descritas en la Sección 3.4 en forma de métodos, y todas las variables y constantes en forma de atributos. Como medio de ilustración, el método *HMOM::DimerConcentration()* es mostrado a continuación,

```

1 void HMOM::DimerConcentration()
2     {
3         betaN= betaN_TV * std::sqrt(T) * std::pow(dimer_volume,
4 1./6.);
5
6         double sticking_coefficient =gammaNuc;
7         double betaC = GetBetaC();
8         double KfmPAH = betaN_TV * std::sqrt(T) *
9 std::pow(pah_volume, 1. / 6.);
10        double aromatics_conc =
11 molar_concentration(Y_PAH,MW_PAH)*1.e6;
12        dimerization_rate = 0.5* KfmPAH * std::pow(aromatics_conc,
13 2.) * sticking_coefficient;
14        double delta = std::pow(betaC, 2.) + 4.0 * betaN *
15 dimerization_rate * std::pow(Navogad, 2.0);
16        conc_DIMER = (std::sqrt(delta) - betaC) /
17 (2.0*betaN*Navogad);
18
19     }

```

el cual calcula la concentración molar de dímeros a partir de la Ec. (88). Esta última es una ecuación cuadrática cuya solución esta implementada entre las

líneas 14 y 17. Un extracto del archivo *hmom.C*, incluyendo los términos fuente desarrollados para cada una de las ecuaciones de transporte, es mostrado en el Apéndice D.

Finalmente, las Ec. (77) y (78), que representan las ecuaciones de transporte para la densidad de número de partículas N_0 , y los momentos $M_{0,0}$, $M_{1,0}$ y $M_{1,0}$, están implementadas en un archivo con el nombre *momentTransport.H*,

```

1 surfaceScalarField gradTf =
2 fvc::interpolate(fvc::grad(T)*0.55*AT*rho*turbulence->DZEff()/T) &
3 mesh.Sf();
4
5 fvScalarMatrix M00Eqn
6 (
7     fvm::ddt(rho, M00) +
8     fvm::div(phi, M00)
9     - fvm::laplacian(turbulence->DZEff()/10, M00)
10    - fvm::div(gradTf, M00)
11    ==
12    M00source
13 );
14 M00Eqn.relax();
15 solve(M00Eqn);
16
17
18 fvScalarMatrix M10Eqn
19 (
20     fvm::ddt(rho, M10) +
21     fvm::div(phi, M10)
22     - fvm::laplacian(turbulence->DZEff()/10, M10)
23     - fvm::div(gradTf, M10)
24     ==
25     M10source
26 );
27 M10Eqn.relax();
28 solve(M10Eqn);
29
30
31 fvScalarMatrix M01Eqn
32 (
33     fvm::ddt(rho, M01) +
34     fvm::div(phi, M01)
35     - fvm::laplacian(turbulence->DZEff()/10, M01)
36     - fvm::div(gradTf, M01)
37     ==
38     M01source
39 );
40 M01Eqn.relax();
41 solve(M01Eqn);

```

```

42
43 fvScalarMatrix NOEqn
44 (
45     fvm::ddt(rho, NO) +
46     fvm::div(phi, NO)
47     - fvm::laplacian(turbulence->DZEff()/10, NO)
48     - fvm::div(gradTf, NO)
49     ==
50     NOsource
51 );
52     NOEqn.relax();
53     solve(NEqn);

```

Cabe mencionar que, para aumentar la estabilidad numérica, el término difusivo, dividido por un factor de 10, para reducir su influencia en la ecuación de transporte general, ha sido añadido a estas ecuaciones.

4.1.5.4. Implementación del modelo DSM

Por último, en la implementación del modelo de formación de hollín DSM, un campo de fracción másica de hollín para cada sección fue creado. Específicamente, el siguiente extracto de código fue incluido dentro del archivo *createFields.H*,

```

1 PtrList<volScalarField> Y(n_bins);
2
3 forAll (Y, i)
4 {
5     Y.set
6     (
7         i,
8         new volScalarField
9         (
10            IOobject
11            (
12                "Y" + name(i),
13                runtime.timeName(),
14                mesh,
15                IOobject::NO_READ,
16                IOobject::AUTO_WRITE
17            ),
18            mesh
19        )
20    );
21
22 }

```


donde n_bins es el número de secciones usadas en las simulaciones y *volScalarField* es la clase a la cual pertenecen todas las secciones creadas con el nombre Y_i . En este caso, i va desde 0 hasta n_bins . Adicionalmente, una clase llamada *dsm.C* fue también creada, la cual incluye todas las ecuaciones descritas en la Sección 3.5 en forma de métodos. Por ejemplo, el método que describe el termino fuente de nucleación para cada sección es mostrado a continuación,

```

1 void DSM::NucSource()
2 {
3     double pah_volume = (CMW/rhoSoot/Na)*NC_PAH;
4
5     double BetaNuc = 4.0*
6     std::sqrt(2.0)*kfm*std::pow(pah_volume,1.0/6.0);
7
8     Q_nuc[0] = 2.0*pah_volume*BetaNuc*
9     std::pow(molar_concentration(Y_PAH,MW_PAH)*Na,2.0);
10    for (int i = 1; i < n_bins; i++)
11    {
12        Q_nuc[i] = 0.0;
13    }
14
15 }

```

En este caso particular de la nucleación, solamente la primera sección cuenta con un valor diferente de 0, el cual es asignado entre las líneas 7 y 8. En el Apéndice E, parte del archivo *dsm.C*, ilustrando la implementación de las ecuaciones relacionadas con los términos fuente restantes, es mostrado.

Finalmente, la Ec. (146), que hace referencia a la ecuación de transporte para cada sección, fue implementada en un archivo adicional llamado *seccionTransport.H*, el cual es mostrado a continuación,

```

1 surfaceScalarField gradTf =
2 fvc::interpolate(fvc::grad(T)*0.55*AT*rho*turbulence->DZEff()/T) &
3 mesh.Sf();
4
5 forAll(Y, i)
6 {
7     volScalarField& Yi = Y[i];
8
9
10    solve
11    (

```

```

12             fvm::ddt(rho, Yi) +
13     fvm::div(phi, Yi)
14 - fvm::div(gradTf, Yi)==Ysourcei
15         );
16     }

```

4.1.6. Esquemas numéricos y solvers lineares

4.1.6.1. fvSchemes

En OpenFOAM, los esquemas numéricos están disponibles en el diccionario *fvSchemes*, presente en el directorio *system*. Este archivo lista los esquemas numéricos disponibles para la aproximación de las derivadas de los diferentes términos que aparecen en las ecuaciones de transporte resueltas en los solvers ejecutados. OpenFOAM ofrece total libertad para elegir entre una amplia gama de esquemas numéricos. Así, la palabra *ddtSchemes* hace referencia a los esquemas de discretización temporal, *gradSchemes* a los de discretización de los gradientes, *divSchemes* a los términos convectivos, *laplacianSchemes* a los términos laplacianos, *interpolationSchemes* hace referencia al método utilizado para interpolar los valores de los centros de las celdas a los centros de las caras, y *snGradSchemes* involucra la discretización de los gradientes normales de superficie evaluados en las caras de los elementos. Los esquemas numéricos empleados en este trabajo están resumidos en la Tabla 7.

Tabla 7. Esquemas numéricos utilizados para las simulaciones RANS y LES

	RANS	LES
ddtSchemes	steadyState	CrankNicolson 0.1
gradChemes	cellimited Gauss linear 0.5	cellMDLimited Gauss linear 0.5
divSchemes	bounded limitedLinear 0.5	Gauss vanLeer
laplacianSchemes	Gauss Linear corrected	Gauss Linear limited 0.777
interpolationSchemes	linear	linear
snGradSchemes	corrected	limited 0.777

Nótese que los esquemas numéricos de primer orden son estables y acotados, pero suelen ser difusivos. Mientras que los de segundo orden son más precisos, pero pueden producir soluciones oscilatorias. En este trabajo, a fin de reducir los errores numéricos, el uso de esquemas numéricos de segunda orden fue priorizado. Cuando necesario, un factor limitador fue también empleado (por ejemplo, en *gradChemes*, un valor igual a 0.5 fue utilizado). En este contexto, cuando el factor limitador es igual a 0, el limitador es desactivado, la precisión aumenta, pero la solución puede volverse infinita. Ajustando el factor limitador a un valor de 1, el limitador está siempre activo, la estabilidad es mejorada, pero la precisión disminuye. En particular, el esquema temporal *CrankNicolson* tiene un factor limitador que cuando es este es igual a 0 la solución adopta un esquema Euler de primer orden, mientras que cuando este factor es igual 1 la solución adopta un esquema *CrankNicolson* puro de segunda orden. En este trabajo, a fin de evitar problemas de convergencia en las simulaciones LES, un factor de 0.1 fue utilizado en el esquema *CrankNicolson*. Además, la difusión numérica fue reducida a través del uso de un valor de CFL (Courant–Friedrichs–Lewy) relativamente pequeño, 0.1, el cual fue determinado a partir de una evaluación de un número grande de simulaciones numéricas.

En el esquema numérico usado para aproximar gradientes, un limitador del tipo *cellimited* fue utilizado en RANS, el cual aplica el limitador a todos los componentes del gradiente. A su vez, en LES, un limitador del tipo *cellMDLimited* fue utilizado, el cual aplica el limitador por separado en cada dirección de las caras de las celdas. Este cambio de limitador fue realizado en LES debido a que *cellMDLimited* es menos difusivo que *cellimited*. En ambos RANS y LES, Gauss lineal fue usado como método de solución de gradientes, el cual es un esquema de segunda orden. En el caso de los términos convectivos resueltos en las simulaciones RANS, el esquema *bounded limitedLinear* fue utilizado. Este es un esquema que presenta una precisión de segunda orden, más estable que la lineal pura. En LES, el esquema *vanLeer*, con precisión de segunda orden y acotado, fue utilizado. Este último esquema fue usado en LES debido a que el esquema *bounded limitedLinear* generaba problemas de convergencia. Para la

discretización laplaciana, en ambas simulaciones RANS y LES, el esquema gauss linear de segundo orden fue utilizado, siendo este el método de interpolación para el coeficiente difusivo. En el caso de LES, para darle más estabilidad a la solución un factor limitador fue utilizado. Para *interpolationSchemes* y *snGradSchemes*, los esquemas numéricos recomendados por OpenFOAM fueron utilizados (CFD direct, 2022).

4.1.6.2. fvSolution

Los solvers usados para resolver los sistemas de ecuaciones resultantes del proceso de discretización, además de sus tolerancias, algoritmos y factores de relajación, son controlados desde el diccionario *fvSolution*, presente en la carpeta *system*. Este diccionario controla en OpenFOAM la forma en que los cálculos numéricos son realizados. Por ejemplo, los solvers lineales son iterativos, es decir, están basados en reducir el residuo de las soluciones a lo largo de una sucesión de iteraciones. El residuo es una medida del error en la solución, de modo que cuanto menor sea este, más precisa será la solución. Un solver linear es expresado de la siguiente forma,

```
1  p
2  {
3      solver          PCG;
4      preconditioner  DIC;
5      tolerance       1e-06;
6      relTol          0.1;
7  }
8
9  pFinal
10 {
11     $p;
12     relTol          0;
13 }
```

donde la línea 1 indica la variable a calcular. En este caso particular, el solver lineal *PCG* utiliza un preconditionador *DIC*, una tolerancia absoluta de $1e-06$ y una tolerancia relativa igual a 0.1. La instrucción *pFinal*, en la línea 9, hace referencia a la corrección final de la presión. Esta corrección utiliza la misma configuración que la instrucción *p*, a excepción de la tolerancia relativa, la cual es igual a 0 en este caso. El solver *PCG* fue utilizado tanto para la presión, como

para la densidad, ya que este es recomendado para simulaciones con múltiples procesadores. Para el caso de la velocidad y el resto de los escalares transportados, el método *PBiCGStab*, con *preacondicionador DILU*, fue utilizado, ya que este es más rápido en comparación al *smoothSolver*. En este caso, una tolerancia absoluta de $1e-08$ y una tolerancia relativa de 0 fueron empleados.

En términos de algoritmos de solución, el sub-diccionario SIMPLE fue utilizado en las simulaciones RANS. Este controla las opciones relacionadas con el algoritmo de acoplamiento presión-velocidad. El método SIMPLE sólo hace 1 corrección; sin embargo, una corrección adicional para tener en cuenta la no ortogonalidad de la malla computacional suele ser usada. En las simulaciones RANS, así, una corrección adicional fue utilizada junto con un factor de relajamiento de 0.8 para todos los campos y ecuaciones. A su vez, en las simulaciones LES, el sub-diccionario PIMPLE fue utilizado. Este controla las opciones relacionadas con el algoritmo de acoplamiento presión-velocidad. En este método, a fin de aumentar la precisión y estabilidad, el número de correctores puede ser definido por el usuario. En las simulaciones LES, 2 correctores fueron utilizados. Correctores ortogonales adicionales pueden ser añadidos, para tener en cuenta el efecto de no ortogonalidad en la malla computacional utilizada. Debido a que las mallas usadas en este trabajo tienen una baja no ortogonalidad, solo 1 corrector adicional fue utilizado aquí. El número de correctores fue limitado al mínimo requerido a fin de no aumentar el tiempo computacional asociado. En el caso de factores de relajamiento, 0.8 fue utilizado para todas las variables y campos considerados.

4.2. CONFIGURACIONES GEOMÉTRICAS

Para estudiar la formación de hollín, dos configuraciones de flujo diferentes fueron estudiadas en este trabajo. Para las simulaciones RANS, la llama tipo jet de Adelaide EHN 1 (Mahmoud et al., 2018) fue utilizada. Mientras que para las simulaciones LES, la llama tipo bluff-body de Adelaide ENB-1 (Rowhani et al., 2021) fue empleada.

4.2.1. Adelaide jet flame 1 (EHN 1)

La llama mostrada en la Figura 21b usa como combustible una mezcla de etileno, hidrógeno y nitrógeno (EHN), con un número Reynolds de 15000 en la salida del jet. La concentración molar de la mezcla de combustible es 39.1% de etileno, 41% de hidrogeno y 19.9% de nitrógeno, mientras que su densidad total es $0.717 \frac{kg}{m^3}$ y su viscosidad dinámica es $1.215 \cdot 10^{-5} \frac{kg}{m \cdot s}$. La velocidad media del jet es de $56.8 \frac{m}{s}$, el cual está rodeado por una corriente de aire de co-flujo con una velocidad media de $1.1 \frac{m}{s}$ y una intensidad turbulenta de 1.5%. Tanto la mezcla de combustible como el aire de co-flujo están a 294 K y 1 bar. La configuración estudiada consiste en un quemador de tubo recto fabricado en aluminio con 4.4 mm de diámetro interior, 1 mm de espesura de pared y una longitud de 385 mm. El conducto de co-flujo es de sección cuadrada de 150x150 mm y la salida del tubo del jet está elevada 18 mm por encima del conducto cuadrado. El tubo es de forma cónica, como mostrado en la Figura 21a.

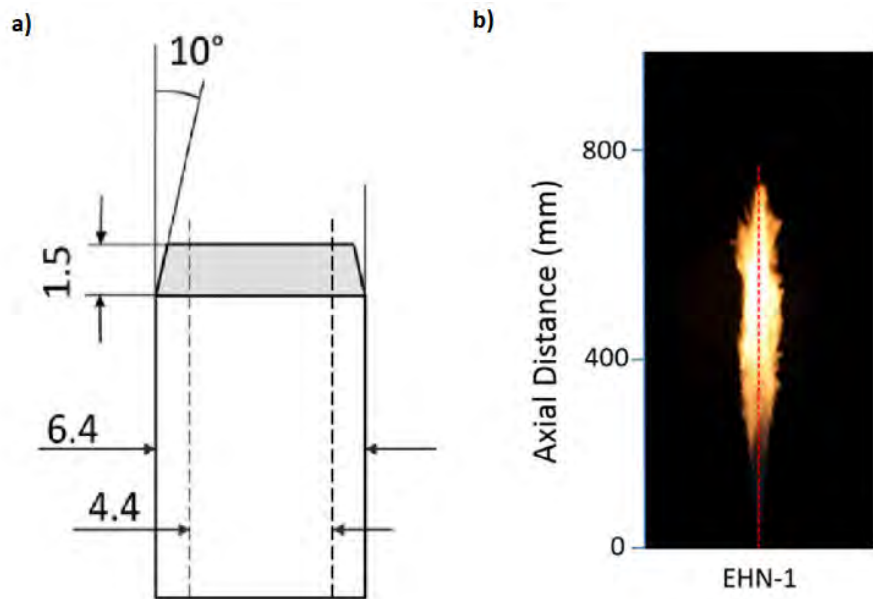


Figura 21. a) Sección cónica del quemador de tubo. b) Fotografías de la llama jet EHN 1 (Mahmoud, 2020).

Las mediciones experimentales disponibles para esta llama son perfiles axiales y radiales de fracción volumétrica de hollín, junto con el perfil axial de temperatura. Las mediciones de temperatura fueron realizadas con un termopar de tipo R de 1 mm de diámetro con una incertidumbre máxima del 4%, mientras que la incandescencia inducida por láser (LII) fue utilizada para medir la fracción volumétrica de hollín, con incertidumbres de alrededor del 25%.

4.2.2. Adelaide bluff-body flame 1 (ENB-1)

La llama bluff-body mostrada en la Figura 22c usa como combustible una mezcla de etileno y nitrógeno (ENB), con un número Reynolds de 15000 en la salida del chorro de combustible. La concentración molar de la mezcla de combustible es 80% de etileno y 20% de nitrógeno, mientras que su viscosidad cinemática es $1.215 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s}$ a 294 K y 1 bar. La velocidad media del chorro de combustible es $32.1 \frac{m}{s}$ y su flujo masico es $0.61 \frac{g}{s}$. El aire en el co-flujo es suministrado por un ventilador centrífugo a una velocidad de $20 \frac{m}{s}$ a 294 K. El esquema del quemador de tipo bluff-body es presentado en las Figura 22a y 22b. El quemador está

compuesto por un tubo interior con diámetro de 4.6 mm centrado dentro de un tubo exterior más ancho de 38 mm de diámetro. Todo el quemador está fabricado en latón, excepto la superficie superior que está fabricada en cerámica para ser resistente a altas temperaturas y minimizar la conducción de calor. El quemador está montado en el centro de una contracción que tiene una sección transversal circular de 190 mm. La superficie del quemador bluff-body está elevado por encima del borde de la contracción una distancia de 10 mm. El cuerpo cilíndrico del quemador y el chorro central tienen una longitud de 385 mm.

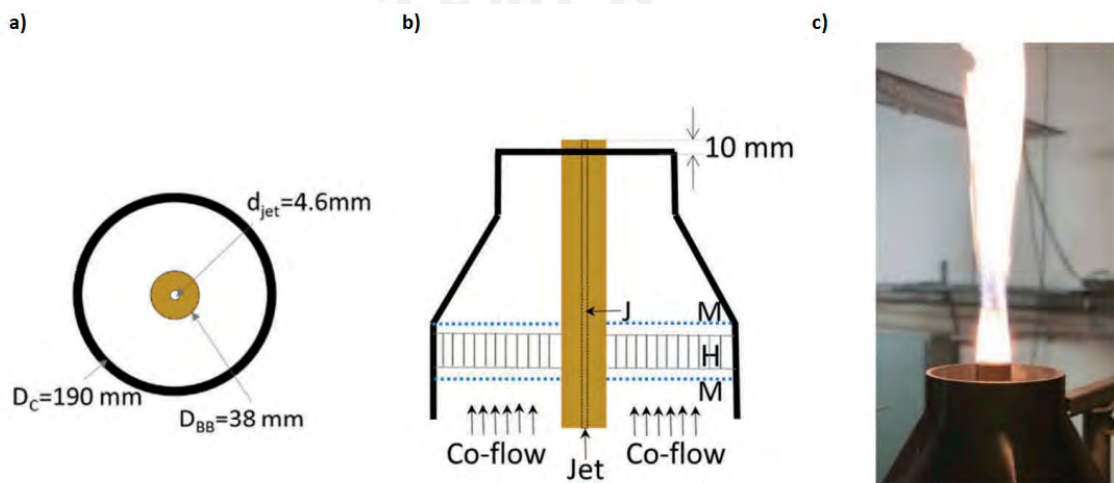


Figura 22. a) Vista superior del quemador bluff-body. b) Vista lateral del quemador bluff-body. c) Fotografías de la llama bluff-body ENB-1 (Rowhani et al., 2021).

Las mediciones experimentales disponibles para esta llama son perfiles axiales y radiales de las componentes medias de la velocidad y de la fracción volumétrica de hollín, junto con sus respectivas fluctuaciones. Velocimetría de imagen de partículas (PIV) e incandescencia inducida por láser (LII) fueron empleadas para medir la velocidad y la concentración de hollín en la llama, respectivamente. La incertidumbre de las mediciones de las componentes de velocidad es de $\pm 0,95 \text{ m/s}$, mientras que para la fracción volumétrica de hollín la incertidumbre es del orden del 25%.

4.3. GENERACIÓN DE MALLA

Para la generación de mallas computacionales, las herramientas *blockMesh* y *snappyHexMesh* incluidas dentro de OpenFOAM fueron utilizadas. En el caso de la llama tipo jet, diversas mallas 2D fueron creadas utilizando *blockMesh*, mientras que en el caso de la llama bluff-body, diversas mallas 3D fueron desarrolladas utilizando *snappyHexMesh*. Cuestiones relativas a la independencia de los resultados a las mallas utilizadas son discutidas en el Capítulo 5.

4.3.1. Malla RANS

Como mostrado en la Figura 23, en OpenFOAM es usual utilizar dominios computacionales 3D axi-simétricos en forma de cuña para realizar simulaciones 2D.

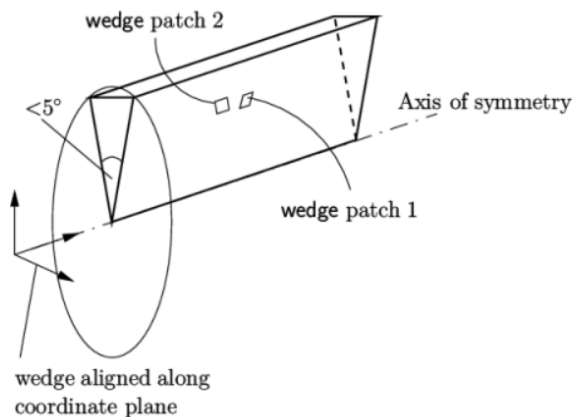


Figura 23. Geometría axi-simétrica utilizando el tipo de parche Wedge en OpenFOAM (CFD direct, 2022).

La malla en forma de cuña creada para el quemador tipo jet tiene un ángulo interno de 5° y condiciones de contorno tipo *wedge* en ambas caras de la cuña. Las condiciones de contorno para el resto de caras es del tipo *patch*, a excepción de las paredes del quemador, las cuales tienen una condición de contorno tipo *wall*. Las dimensiones del dominio computacional son 870 mm en el eje z y 75 mm en el eje x. Además, la longitud del ducto del jet es de 70 mm. La malla es

más refinada en la región del dominio próxima al chorro de combustible, ya que esta es la región de interés. A su vez, para reducir tiempo computacional, tanto en la región del co-flujo, como en la zona más alejada de la llama, los elementos de la malla son más gruesos. La malla computacional empleada contiene 33200 elementos. El elemento más pequeño tiene un tamaño característico de 0.125 mm y está situado en la zona de salida del chorro de combustible, sobre la pared interior del tubo de descarga de combustible, lo que garantiza un y^+ menor a 4 en la pared. El elemento más grande tiene a su vez un tamaño característico de 10 mm, y está ubicado en la región de salida más alejada radialmente.

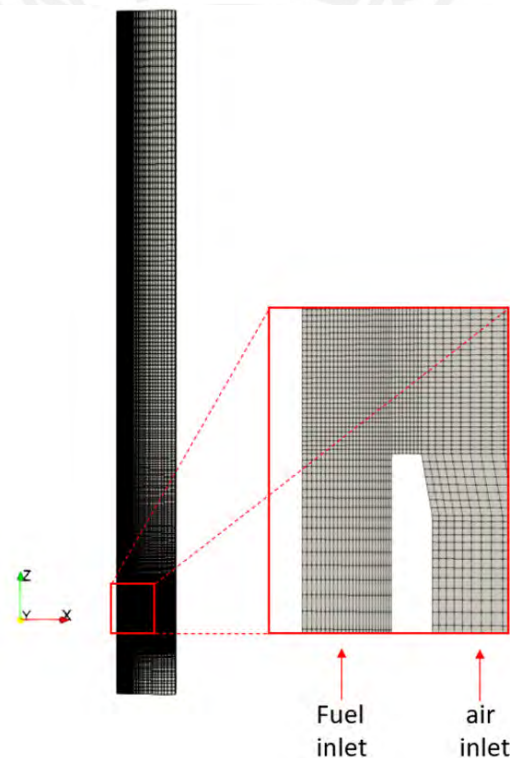


Figura 24. Geometría axi-simétrica utilizando el tipo de parche wedge en OpenFOAM (CFD direct, 2022).

El archivo para la generación de esta malla usada en las simulaciones RANS, que tiene el nombre *blockMeshDict*, está incluido en el Apéndice F.

4.3.2. Malla LES

Como el mostrado en la Figura 25, a partir de elementos hexaédricos, la utilidad *snappyHexMesh* genera automáticamente mallas tridimensionales que están conformados por otro tipo de elementos, incluyendo hexaedros, tetraedros, y elementos piramidales.

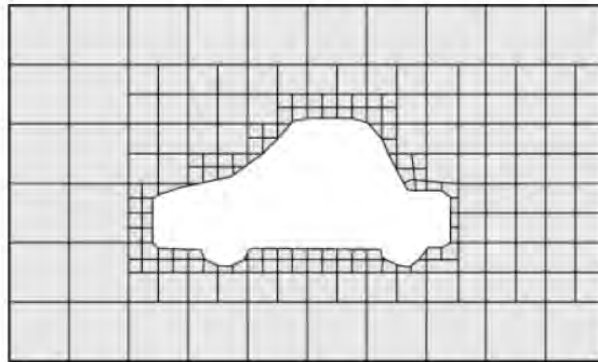


Figura 25. Mallado usando *snappyHexMesh* (CFD direct, 2022).

Más específicamente, primero, un dominio computacional es definido mediante *blockMesh*, el cual crea una malla de fondo que consiste únicamente de celdas hexaédricas. Luego, la malla es ajustada a una geometría de superficie en formato STL u OBJ. En este trabajo, la geometría de superficie utilizada para generar la malla LES es la mostrada en la Figura 26, y el dominio computacional creado con *blockMesh* es un cilindro con 850 mm de altura y un diámetro de 190 mm.

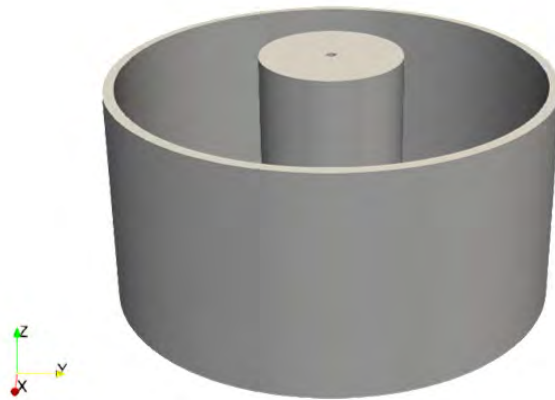


Figura 26. Geometría de superficie tipo bluff-body en formato STL.

Mediante el refinamiento progresivo de la malla inicial, y dividiendo la malla hexaédrica en celdas más pequeñas en la región cercana a la superficie de la geometría considerada, la malla mostrada en la Figura 27 es obtenida. Los *settings* requeridos para la generación de la malla están dentro del diccionario `snappyHexMesh`, cuya descripción completa está disponible en la guía usuario del OpenFOAM (CFD direct, 2022).

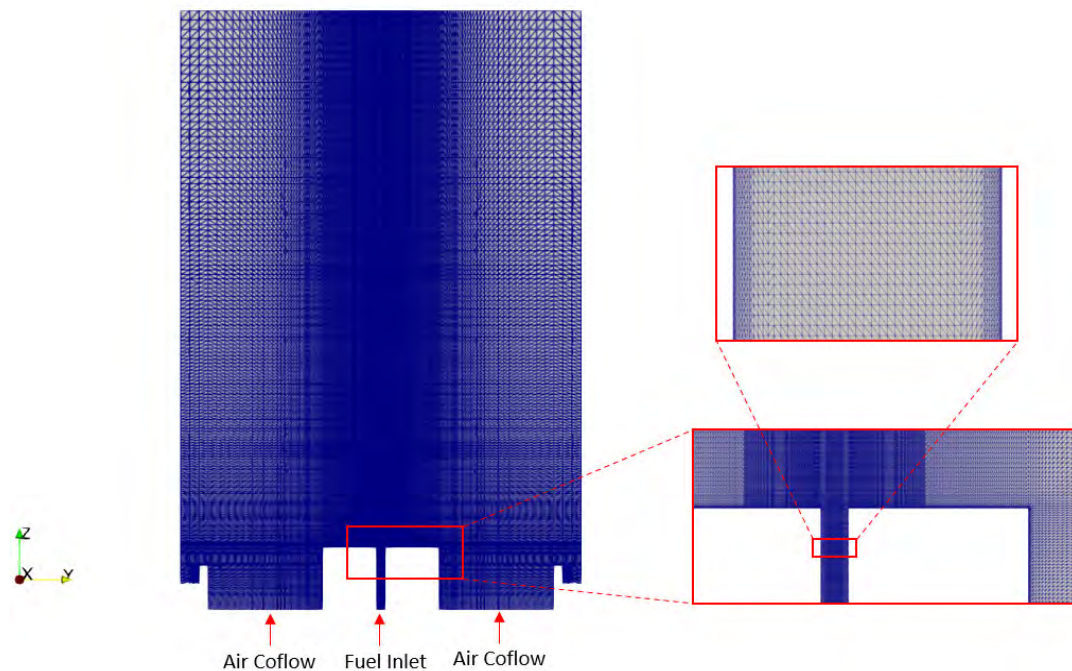


Figura 27. Malla computacional generada utilizando *snappyHexMesh*.

En este caso, condiciones de contorno tipo *patch* fueron utilizadas en todas caras del dominio computacional, a excepción de las paredes del quemador, las cuales tienen una condición de contorno tipo *wall*. Las dimensiones del dominio computacional son 850 mm en el eje z y 95 mm en el eje radial, mientras que la longitud del ducto es de 20 mm. Como mostrado en la Figura 27, la malla es más refinada en toda la región del ducto de combustible, y en la región con radio de 10 mm que se extiende hasta 100 mm por encima de la salida del jet. Adicionalmente, a fin de describir la capa límite adecuadamente y reducir el valor de y^+ , la malla cuenta con 2 niveles de refinamiento en toda la pared del bluff-body. Así, la malla computacional empleada incluye 10.3 millones de elementos, donde el elemento más pequeño tiene un tamaño característico de 0.08 mm y está situado en la zona de salida del chorro de combustible, sobre la pared interior del tubo de descarga de este, lo que garantiza un y^+ menor a 1 en la pared. El elemento más grande tiene a su vez un tamaño característico de 20 mm, el cual está ubicado en la región de salida más alejada radialmente.

4.4. CONDICIONES DE CONTORNO E INICIALES

Las condiciones de contorno e iniciales usadas para simular usando los solvers *FlameletSimpleFoam* y *FPVFoam* las dos configuraciones de flujo estudiadas aquí son descritas en sección. Nótese que en el caso de las variables transportadas en los modelos de formación de hollín, sus condiciones iniciales y de contorno están en archivos adicionales que tienen la forma del documento mostrado en el Apéndice G.

4.4.1. Caso RANS

Una vez que el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ fue empleado para realizar las simulaciones RANS, es necesario obtener valores iniciales para los parámetros de turbulencia k y ε . Estos valores han sido obtenidos aquí a partir de la velocidad media U , la intensidad turbulenta I , y la escala integral de longitud de la turbulencia l . De acuerdo con (Rodríguez, 2019),

$$k = \frac{3}{2}(IU)^2 \quad (147)$$

$$\varepsilon = C_\mu \frac{k^{3/2}}{l} \quad (148)$$

$$l = 0.07D \quad (149)$$

donde C_μ es una constante igual a 0.09 y D es una longitud característica. Así, las condiciones iniciales para la simulación RANS están resumidas en la Tabla 8,

Tabla 8. Condiciones iniciales para las simulaciones RANS.

	U	p	nut	alphat	T	k	ε	Z	Zvar	H
	$\left(\frac{m}{s}\right)$	$\left(\frac{kgm}{s}\right)$	$\left(\frac{m^2}{s}\right)$	$\left(\frac{m^2}{s}\right)$	(K)	$\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$	$\left(\frac{m^2}{s^3}\right)$	-	-	$\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$
Ingreso de combustible	56.8	101325	0	0	294	11.149	19679	1	0	1.178 10 ⁶
Ingreso de aire	1.1	101325	0	0	294	0.000408	0.00007	0	0	-4150

donde *alphat* es la difusividad térmica turbulenta y *nut* es la viscosidad cinemática turbulenta. Estos parámetros cuentan con un valor inicial de 0 debido a que serán calculados por el modelo $k - \epsilon$ durante la simulación. Los valores de *Z* y *Zvar* son definidos según la guía de usuario del solver *flameletSimpleFoam* (Holzmann, 2012), mientras que los valores de entalpia (H) son obtenidos a partir del solver, cuando este es iniciado por primera vez.

Como otras herramientas de CFD, OpenFOAM requiere la especificación de condiciones de contorno en todas las fronteras que rodean el dominio computacional. Las condiciones de contorno particulares utilizadas en las simulaciones RANS están resumidas en la Tabla 9. En esta tabla, *fixedValue* representa una condición de contorno tipo Dirichlet que necesita un valor, uniforme o no uniforme, para ser especificado en el contorno. La condición *noSlip* es una condición *fixedValue* con un valor fijo de velocidad igual a 0. *zeroGradient* es una condición de contorno homogénea tipo Neumann, la cual indica que el gradiente del parámetro correspondiente es cero en la dirección perpendicular al contorno.

Adicionalmente, la combinación de la condición *totalPressure* en la presión y *pressureInletOutletVelocity* en la velocidad es común para los contornos donde es producido algún flujo de entrada, y la velocidad del flujo asociada es desconocida (por ejemplo, la atmósfera). En particular, la condición *pressureInletOutletVelocity* especifica *zeroGradient* en todo instante, excepto en el componente tangencial que está definida con un *fixedValue* de 0 por defecto. La condición *calculated* significa que la propiedad será completamente definida por las otras condiciones de contorno y propiedades definidas en el folder *constant*. Para modelos de turbulencia de bajo y alto número de Reynolds, la condición de contorno *nutkWallFunction* proporciona una restricción de pared sobre la viscosidad turbulenta basada en la energía cinética turbulenta. La condición *alphatWallFunction* proporciona una restricción de pared sobre la difusividad térmica turbulenta para casos compresibles. *kqRWallFunction* es una condición de contorno utilizada en la energía cinética turbulenta para casos de alto número de Reynolds, basada en la condición *zeroGradient*. Finalmente, la

condición *epsilonWallFunction* proporciona una restricción de pared en la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta y hereda los rasgos de la condición de contorno *fixedValue*. Una mayor descripción sobre las condiciones de contorno empleadas aquí puede ser encontrada en la guía de usuario del OpenFOAM (CFD direct, 2022).

Tabla 9. Condiciones de contorno para las simulaciones RANS.

	Ingreso de combustible	Ingreso de aire	Salida	Pared del tubo
$U \left(\frac{m}{s}\right)$	fixedValue	fixedValue	pressureInlet	noSlip
			-	
			OutletVelocity	
$p \left(\frac{kgm}{s}\right)$	zeroGradient	zeroGradient	totalPressure	zeroGradient
	t	t		
$\nu_{t} \left(\frac{m^2}{s}\right)$	calculated	calculated	calculated	nutkWallFunction
α_{p}	calculated	calculated	calculated	alphatWallFunction
$\left(\frac{m^2}{s}\right)$				
$T (K)$	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
$k \left(\frac{m^2}{s^2}\right)$	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	kqRWallFunction
$\varepsilon \left(\frac{m^2}{s^3}\right)$	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	epsilonWallFunction
Z	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
Zvar	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
$H \left(\frac{m^2}{s^2}\right)$	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient

4.4.2. Caso LES

Para la inicialización de las simulaciones LES, una simulación LES preliminar, realizada en un paso anterior usando una malla menos refinada, fue utilizada. Específicamente, mediante la herramienta *mapFields* incluida en OpenFOAM, la solución obtenida con la malla menos refinada fue mapeada a las simulaciones

con las mallas más finas y usada como condicione inicial de estas. Estas condiciones iniciales para las simulaciones LES son mostradas en la Tabla 10. Al igual que en las simulaciones RANS, *nut* y *alphat* cuentan con un valor inicial de 0 debido a que serán calculados por el modelo de turbulencia correspondiente. Además, los valores de *Zmix*, *varZ*, *chi* y *Zeta* fueron definidos de acuerdo con la guía de usuario del solver *FPVFoam*.

Tabla 10. Condiciones iniciales para las simulaciones LES.

	U $(\frac{m}{s})$	p $(\frac{kgm}{s})$	nut $(\frac{m^2}{s})$	alphat $(\frac{m^2}{s})$	T (K)	Zmix -	varZ -	Zeta -	chi -
Ingreso de combustible	32.1	101325	0	0	294	1	0	0	0
Ingreso de aire	20	101325	0	0	294	0	0	0	0

Las condiciones de contorno usadas en las fronteras que rodean el dominio computacional considerado en las simulaciones LES están resumidas en la Tabla 11. Nótese que, en este caso, los modelos de pared para las variables *nut* y *alphat* no son más necesarios, pues la malla empleada es lo suficientemente fina (*y+* menor a 1) como para describir adecuadamente la región cercana a la pared. Sin embargo, en simulaciones numéricas con mallas menos refinadas (con *y+* mayor a 1), el modelo de pared *nutUSpaldingWallFunction* fue utilizado. Este último modelo proporciona, para modelos de turbulencia de bajo y alto número de Reynolds, una restricción de pared sobre la viscosidad turbulenta, proporcionando un perfil continuo en la pared.

Tabla 11. Condiciones de contorno para las simulaciones LES

	Ingreso de combustible	Ingreso de aire	Salida	Paredes
$U \left(\frac{m}{s}\right)$	Turbulent-DFSEMinlet	Turbulent-DFSEMinlet	presssureInlet-OutletVelocity	noSlip
$p \left(\frac{kgm}{s}\right)$	zeroGradient	zeroGradient	totalPressure	zeroGradient
$\nu_{t} \left(\frac{m^2}{s}\right)$	calculated	calculated	calculated	zeroGradient
α_{p}	calculated	calculated	calculated	zeroGradient
$T (K)$	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
Z_{mix}	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
ν_{r}	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
$Zeta$	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
χ	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient

Adicionalmente, la condición de contorno turbulentDFSEMinlet fue también empleada. Esta condición hace referencia a un generador de turbulencia sintética basado en el método “divergence free synthetic eddy” desarrollado por Poletto et al. (2013). Este método es mostrado en la Figura 28, donde los remolinos sintéticos, cada uno de los cuales representa un conjunto de fluctuaciones de velocidad, son convectados a través de una sección rectangular que rodea por completo el plano de entrada sobre el que es requerido un campo de velocidad turbulento. Estos remolinos son conectados en cada paso de tiempo por la velocidad media impuesta. Para usar este método es necesario la realización de una simulación RANS preliminar, de la cual los perfiles de campo de velocidad U , campo de tensores de Reynolds R y escalas de longitud de turbulencia L son obtenidos, los cuales son usados como datos de entrada en el generador de turbulencia sintética.

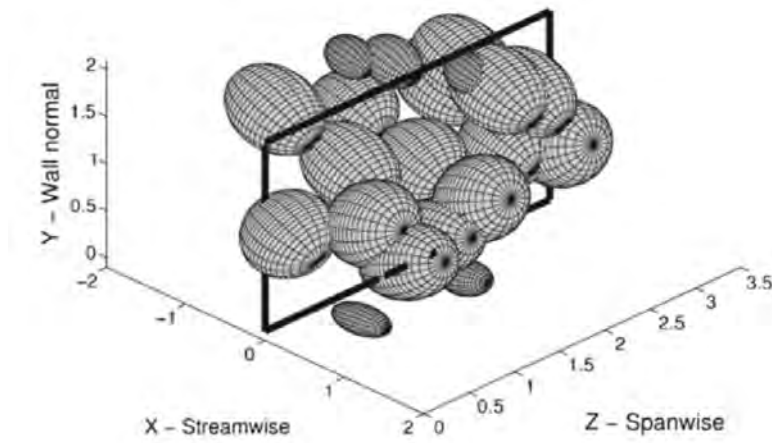
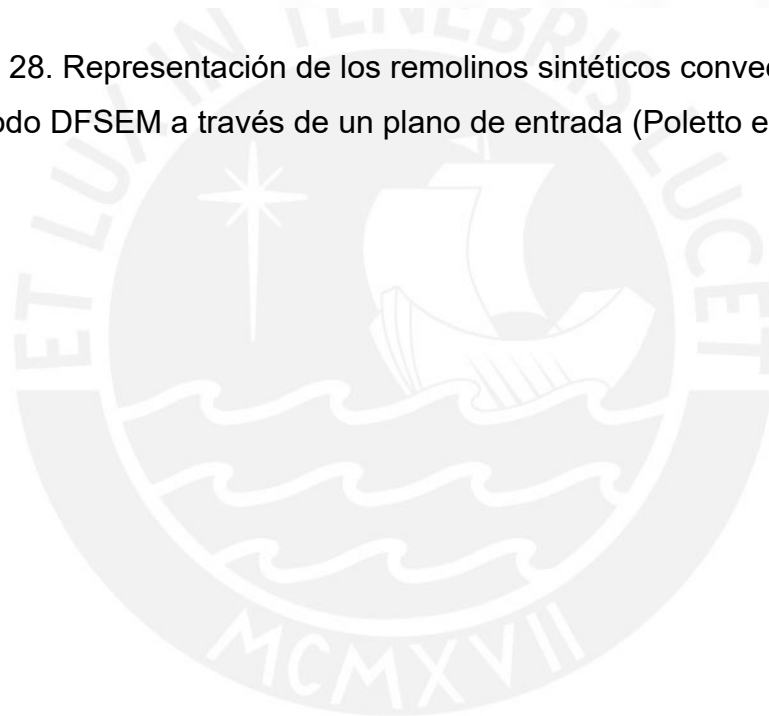


Figura 28. Representación de los remolinos sintéticos convectados con el método DFSEM a través de un plano de entrada (Poletto et al., 2013).



Capítulo 5 RESULTADOS Y DISCUSIONES

Los principales resultados obtenidos en este trabajo son presentados y discutidos en este capítulo. Más específicamente, los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas realizadas en un contexto RANS, usando una llama turbulenta tipo jet, son primeramente descritos. A continuación, los resultados de una llama turbulenta tipo bluff-body obtenidos usando un abordaje LES son discutidos.

5.1. CONTEXTO RANS

Debido a que su costo computacional es significativamente menor cuando comparadas a las del tipo LES, simulaciones tipo RANS fueron primeramente consideradas. En consecuencia, estas primeras simulaciones permitieron el desarrollo de los modelos de formación de hollín discutidos en este trabajo. Como indicado en el Capítulo 4, específicamente, las simulaciones numéricas realizadas en un contexto RANS involucraron una llama turbulenta tipo jet de Adelaide EHN 1 (Mahmoud et al., 2018). Los principales resultados obtenidos para esta configuración de flujo reactivo son discutidos en esta sección.

5.1.1. Generación de flamelets

Las soluciones de flamelet usadas en las simulaciones tipo RANS fueron generadas empleando la librería libOpenSMOKE (Cuoci, 2010), usando el mecanismo cinético detallado ABF (Appel et al., 2000) en formato CHEMKIN. Este mecanismo cinético contiene 101 especies químicas, 543 reacciones, y el mayor PAH contabilizado es el Pireno ($C_{16}H_{10}$ o A4). Más específicamente, el referido mecanismo cinético, junto a sus propiedades termodinámicas y de transporte en formato CHEMKIN, fueron preprocesadas mediante un algoritmo de interpretación dentro de la misma librería. Luego, como mostrado en la Figura 29, cada flamelet fue resuelto utilizando 40 puntos no equiespaciados de tasa de disipación escalar estequiométrica, involucrando un rango de valores desde 10^{-6} s^{-1} (equilibrio) hasta 340 s^{-1} (extinción). Para describir adecuadamente las

curvas de solución de cada flamelet, como mostrado en la Figura 30, un número de puntos igual a 100 fue considerado.

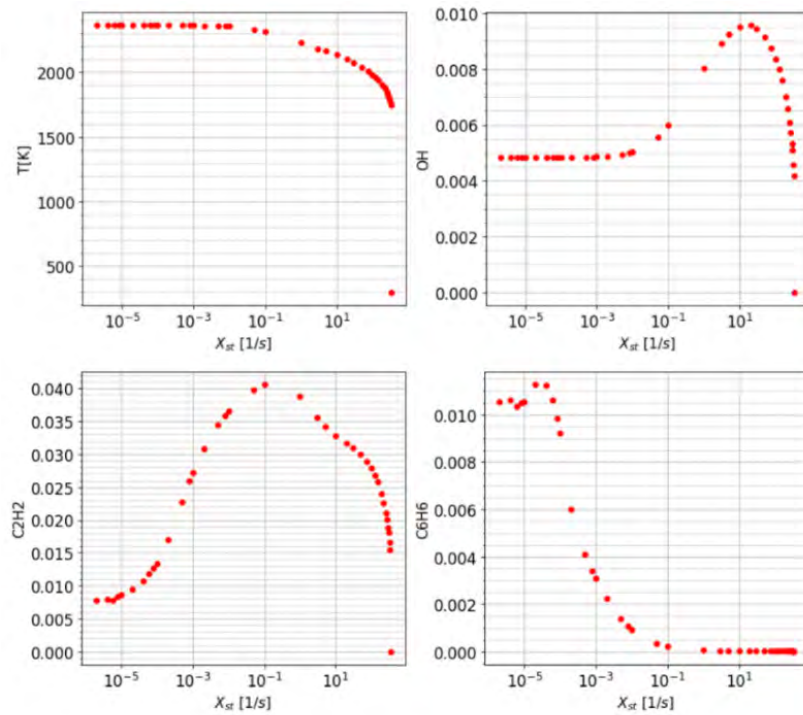


Figura 29. Librería de flamelets de T y fracción másica de C_2H_2 , OH y C_6H_6 como función de la tasa de disipación escalar estequiométrica

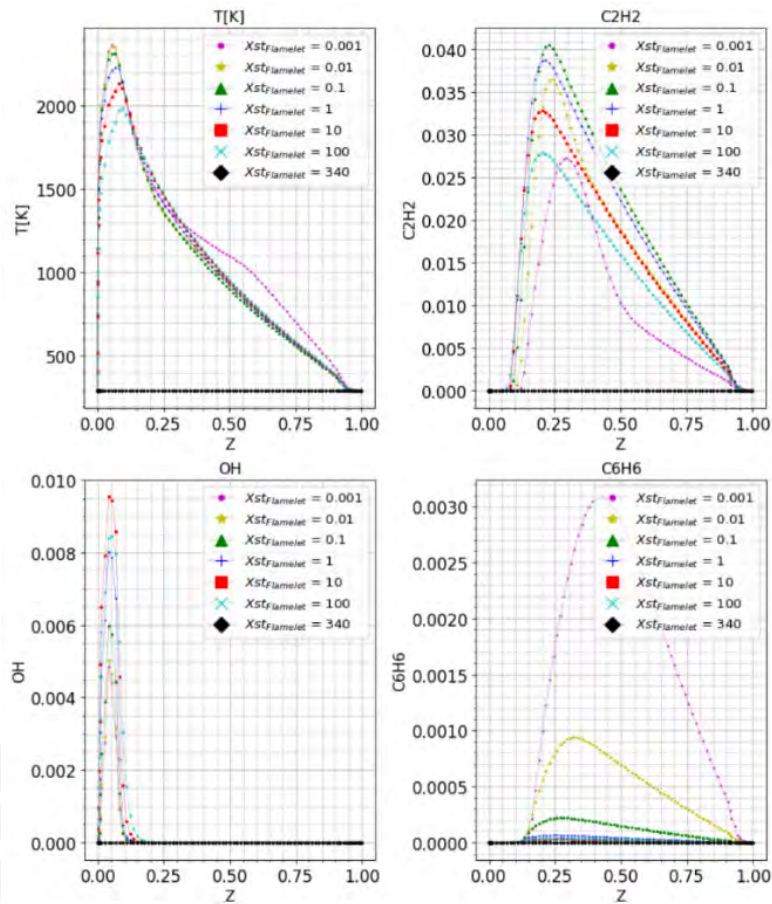


Figura 30. Librería de flamelets de T y fracción másica de C_2H_2 , OH y C_6H_6 como función de la fracción de mezcla

Finalmente, para considerar los efectos de la radiación, alrededor de 10 defectos de entalpia diferentes, que van desde 0 a 500 kJ/kg , fueron utilizados. De esta forma, la librería de flamelets usada en las simulaciones RANS involucró un total de 400 flamelets, los cuales fueron procesados aplicando una PDF adecuada en el espacio de fracciones de mezcla y utilizados por el solver *FlameletSimpleFoam*.

5.1.2. Estudio de independenciam de malla

En contextos RANS, el tamaño de los elementos de las mallas computacionales utilizadas es un parámetro arbitrario. Como tal, su influencia en los resultados obtenidos debe ser siempre evaluada. En este trabajo, a fin de poder fiarse de los resultados obtenidos en las simulaciones RANS, un estudio de

independencia de malla fue realizado considerando 3 mallas diferentes, constituidas estas por 12200, 22300 y 33200 elementos. En particular, en cada malla considerada, los perfiles axiales de las fracciones másicas de las principales especies precursoras de hollín y los perfiles axiales de temperatura fueron analizados. Así, la Figura 31, muestra los perfiles axiales de las fracciones másicas de C_2H_2 , OH , C_6H_6 y O_2 . Como puede ser observado de esta figura, cuando 22300 elementos de malla o más son utilizados, los resultados asociados ya no cambian en demasía. En el caso de los perfiles de temperatura, las diferencias entre los resultados obtenidos con estas mallas son despreciables, por lo que no es necesario mostrarlas. En consecuencia, una malla de 22300 elementos fue utilizada en las simulaciones RANS realizadas en este trabajo.

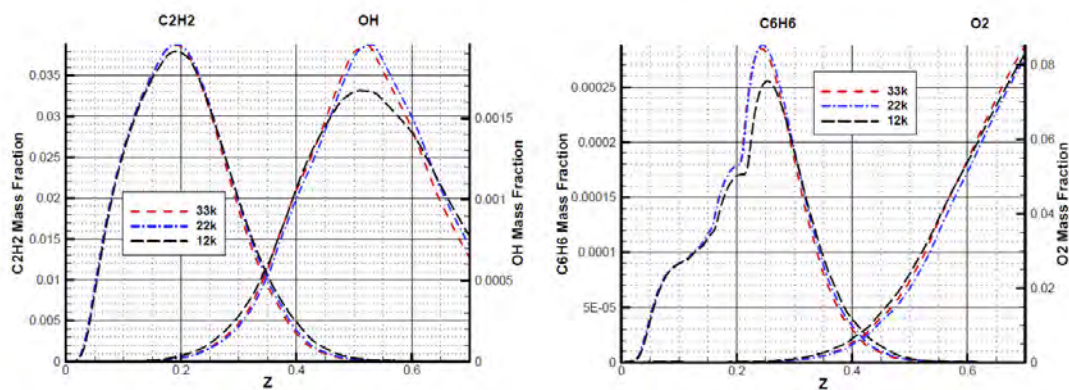


Figura 31. Perfiles axiales de fracciones másicas de C_2H_2 , OH , C_6H_6 y O_2 .

5.1.3. Campos de temperatura y fracción volumétrica de hollín

En la Figura 32, los campos de temperatura media obtenidos usando los 4 modelos de hollín estudiados en este trabajo son mostrados. Como descrito en la Sección 2.4, el acoplamiento de hollín con el modelo de combustión es realizado a través de la radiación, por lo que los 4 perfiles de temperatura deberían ser diferentes. En términos cualitativos, los perfiles de temperatura muestran una distribución idéntica, con un valor pico de 2000 K situado entre 0.45 y 0.65 m por encima de la salida del chorro de combustible. Sin embargo, al realizar las curvas de temperatura en el eje axial, las diferencias son más notables. Estas curvas son presentadas más adelante en la sección 5.1.4.

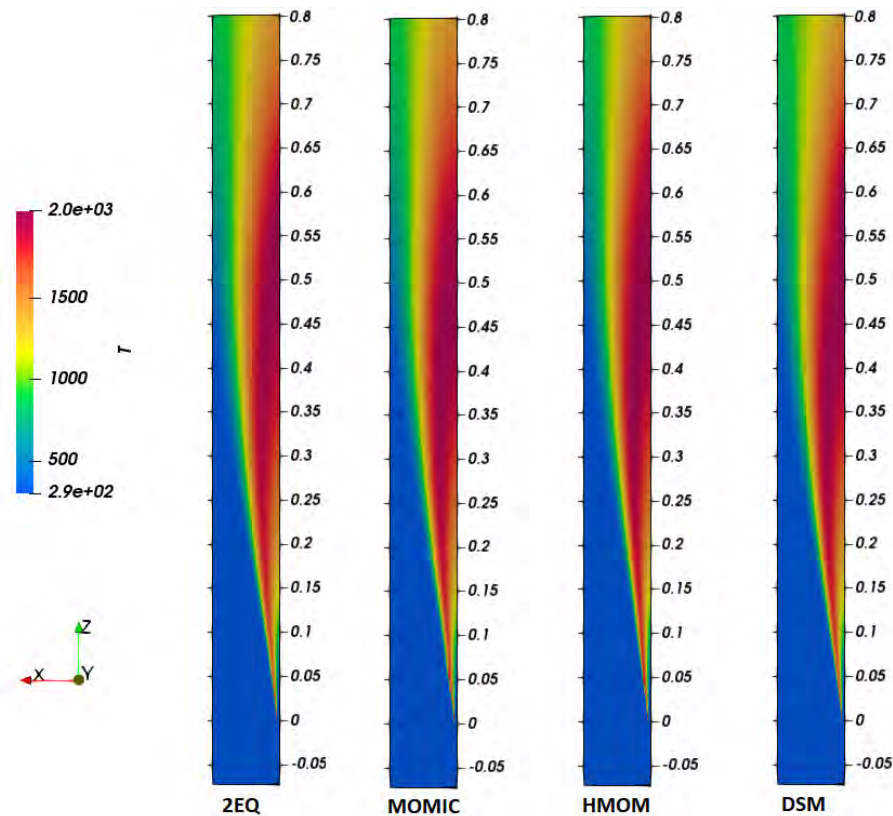


Figura 32. Contornos de temperatura obtenidos con los métodos: 2-ecuaciones, MOMIC, HMOM y DSM

Los contornos de las fracciones másicas de las especies presentes en los modelos de hollín son presentados Figura 33. Al igual que en el caso de la Figura 32, cualitativamente no hay variación de estas especies entre los modelos, por lo que los resultados presentados en la Figura 33 son únicamente los del modelo HMOM. El perfil de OH da una idea de la forma y tamaño de la llama, teniendo una altura aproximada de 0.7 m, coincidiendo con los resultados experimentales (Mahmoud et al., 2018). En el caso del O_2 , los valores máximos obtenidos están en la zona externa a la llama, debido a la presencia de aire en el ambiente. Tanto el contorno de OH como el de O_2 , intervienen de forma drástica en la oxidación del hollín, esto significa que en las zonas donde hay mayor presencia de estas especies (siendo la zona radial y el final de la llama), la concentración de hollín es disminuida o suprimida. La mayor concentración de C_2H_2 corresponde a la zona comprendida entre 0.1 y 0.35 m de altura, lo que significa que en esa zona

iniciará el crecimiento superficial del hollín. En el caso del benceno C_6H_6 , la especie precursora del hollín en los modelos detallados tiene sus valores máximos entre 0.25 y 0.35 m siendo más estrecho que el contorno del C_2H_2 . La diferencia entre los modelos detallados y el método de dos ecuaciones es debida principalmente al precursor del hollín. El método de dos ecuaciones que utiliza C_2H_2 presentará una diferencia significativa con respecto a los modelos detallados basados en C_6H_6 . Los PAH de orden superior no fueron empleados en los modelos detallados debido a la limitación del modelo de combustión para predecir estas especies.

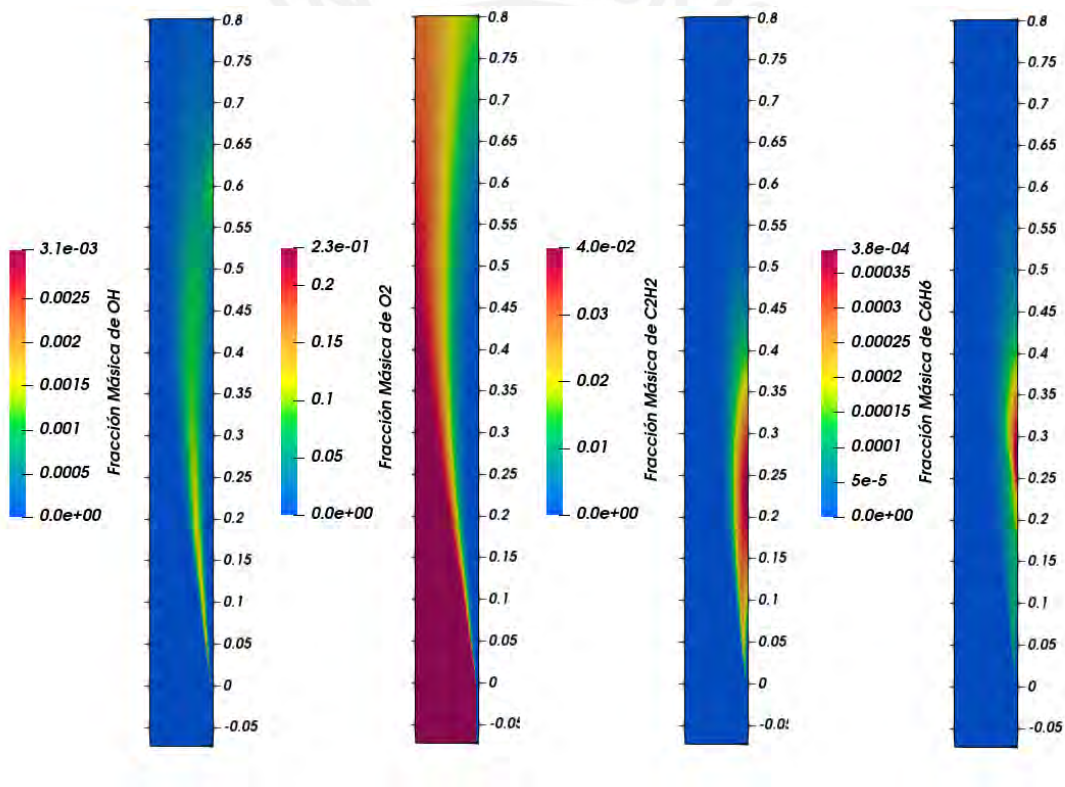


Figura 33. Contornos de fracción másica de OH , O_2 , C_2H_2 y C_6H_6 obtenidos con el método HMOM

En la Figura 34 los contornos de fracción volumétrica de hollín, obtenidos con los 4 diferentes modelos son presentados. El hollín está presente a partir de 0.25 m por encima de la salida del chorro, lo cual fue conseguido gracias a una modificación del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar. Dally et al. (1998) sugieren que, para mejorar la predicción de la tasa de decaimiento de la

velocidad axial de un chorro redondo, el coeficiente C_1 (presente en la ecuación de transporte de ε) debería modificarse. Rowhani et al. (2022), realizaron una modificación de este coeficiente optando por el valor de 1.6. Para este trabajo, un valor de 1.53 fue tomado ya que valores mayores generaban que el hollín saliera del dominio computacional. En términos cualitativos, el método DSM tiene una mayor presencia en la zona final del dominio, esto indica que la tasa de oxidación es muy baja para este modelo. En el caso del método de 2 ecuaciones, es el que presenta la menor área de hollín, esta diferencia principal radica en que a diferencia de los otros 3 modelos, este modelo tiene como especie precursora C_2H_2 mientras que los otros tres modelos tienen benceno C_6H_6 . En el caso del método MOMIC y HMOM, existe una ligera diferencia entre los dos modelos. Esto debido a que el modelo HMOM tiene la ventaja de poder predecir cadenas de agregados de hollín y a que en el método MOMIC la condensación no fue implementada, por lo que la tasa de crecimiento superficial es menor.

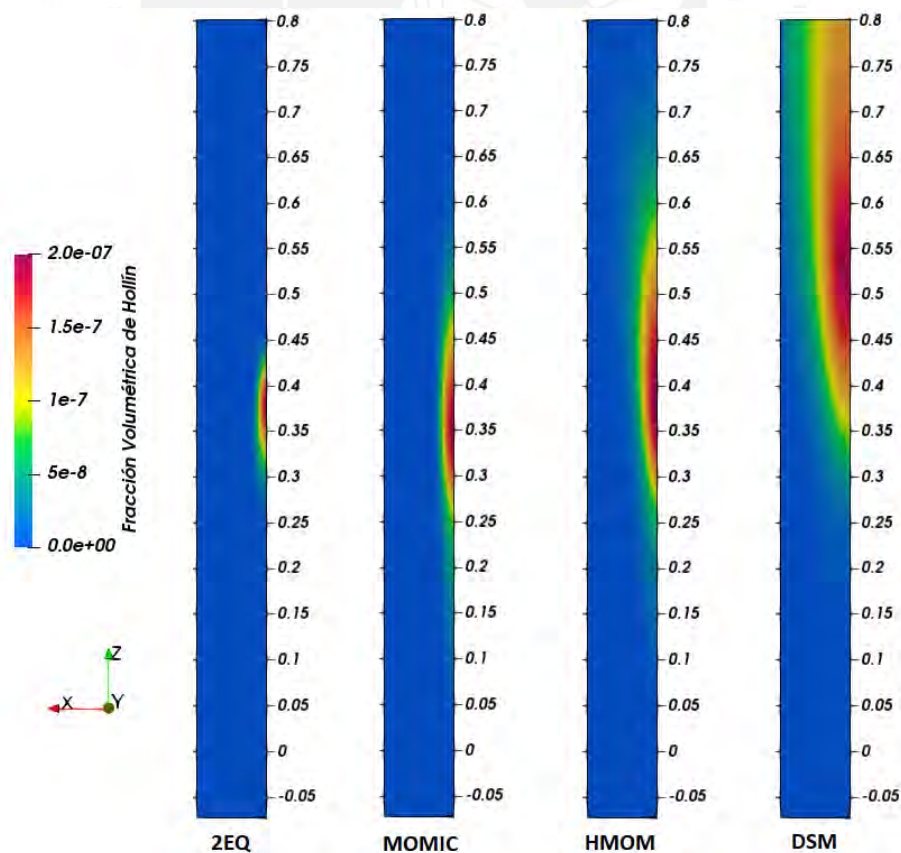


Figura 34. Contornos de fracción volumétrica de hollín obtenidos con los métodos: 2-ecuaciones, MOMIC, HMOM y DSM

5.1.4. Perfiles de temperatura y fracción volumétrica de hollín

Los perfiles de temperatura y fracción volumétrica de hollín a lo largo de la línea de centro de la llama obtenidos usando los 4 modelos de formación de hollín estudiados en este trabajo están mostrados en la Figura 35. Como medio de comparación, esta figura también incluye los resultados experimentales de Mahmoud et al. (2019). Como observado de la Figura 35, todos los modelos predicen adecuadamente el valor máximo de hollín. Esto ocurre debido a que las constantes empíricas presentes en cada modelo han sido ajustadas de forma a reproducir más fielmente los experimentos. Una descripción más detallada de este ajuste es mostrada en la Sección 5.1.6. En el caso del modelo de dos ecuaciones, el valor máximo de hollín está situado a 0.37 m por encima de la descarga del chorro de combustible. Este modelo presenta el perfil más estrecho debido al uso de una especie precursora de hollín (acetileno) diferente a la de los otros modelos (benceno). El modelo MOMIC predice, a su vez, un perfil similar a los resultados experimentales y parecido al HMOM. Esto puede deberse al hecho de que ambos modelos están basados en el método de momentos original (Frenklach, 2002b), con la salvedad de que el HMOM es una mejora de este modelo, siendo capaz de predecir, a diferencia del MOMIC, las primeras partículas nucleadas. El pico de HMOM y MOMIC este situado casi en la misma posición axial, 0.35 m por encima de la descarga del chorro de combustible, pero un poco alejado de los datos experimentales. Esta discrepancia está posiblemente asociada a las limitaciones en la descripción de la dinámica del flujo reactivo y a las limitaciones del modelo k-epsilon utilizado. En el caso del modelo DSM, este es el que mejor captura la posición axial del pico de hollín (0.5 m sobre el chorro). Sin embargo, este modelo no predice adecuadamente el decaimiento en la fracción volumétrica de hollín observada en los resultados experimentales. Esto último puede deberse a una limitada tasa de oxidación de hollín. Es de esperarse que, al aumentar la eficiencia de oxidación, el perfil de

hollín predicho con este modelo DSM sea mucho más similar a aquel caracterizando los datos experimentales.

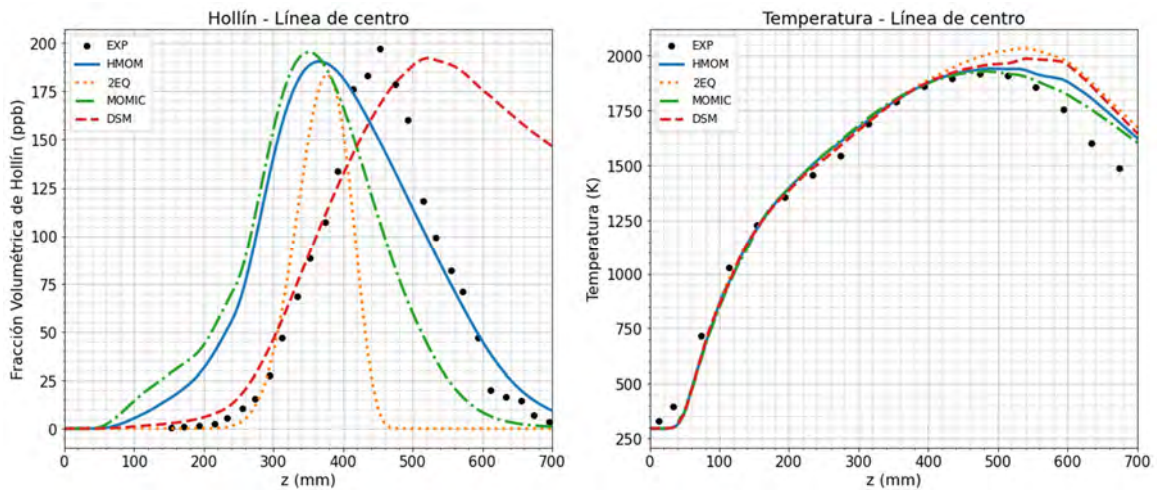


Figura 35. Perfiles de fracción volumétrica de hollín y temperatura a lo largo de la línea de centro de la llama.

Respecto al perfil de temperatura, los 4 modelos predijeron perfiles similares, siendo los más precisos los métodos MOMIC y HMOM. Las ligeras discrepancias con los experimentos pueden deberse a que el perfil de hollín está desfasado 0.5 m con respecto a los datos experimentales. En el caso del modelo DSM y el modelo de 2 ecuaciones, estos muestran perfiles de temperatura con valores máximos más altos. En el modelo de 2 ecuaciones esto es debido a que el perfil de hollín es muy pequeño, por lo que el efecto de la radiación de hollín es mínimo y la temperatura no decae como esperado. En el caso del modelo DSM, esto es debido a que el hollín es formado tarde, es decir, después del pico de temperatura, por lo que el descenso en el perfil de hollín es retrasado también.

Finalmente, perfiles radiales de fracción volumétrica de hollín son mostrados en la Figura 36. Nótese que aunque los modelos MOMIC y HMOM presentan perfiles axiales similares (Figura 35), radialmente el método HMOM describe mejor el hollín formado. Esto es debido al hecho de que este modelo, a diferencia del MOMIC, incluye la condensación de PAH en su superficie como un mecanismo de crecimiento de hollín adicional, y también porque el método HMOM considera el área superficial y el volumen como parte de la ecuación

general de momentos. En el caso del modelo de 2 ecuaciones, observase que, en la posición axial de 392 mm, este predice valores de hollín cercanos a los experimentales (valores máximos alrededor de 175 ppb), pero en las otras posiciones axiales su valor es casi cero. Debido a la limitada oxidación indicada anteriormente, el modelo DSM sobre predice el hollín en la parte final de la llama. Por tanto, debido a su formulación en función de superficie y volumen, el método HMOM es el más adecuado para predecir el hollín en la llama tipo jet estudiada aquí.

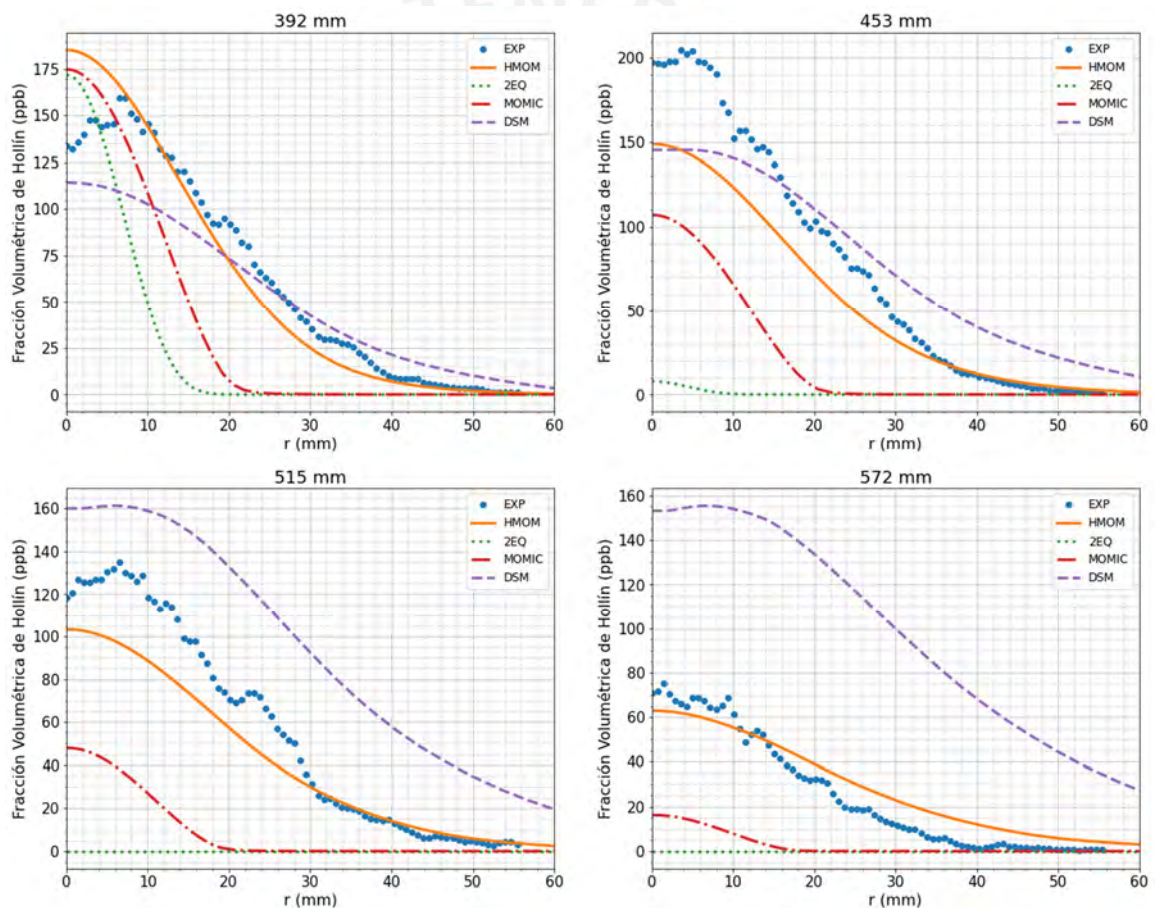


Figura 36. Perfiles radiales de fracción volumétrica de hollín en diferentes posiciones axiales (alturas) de la llama

5.1.5. Efecto de la radiación

La radiación del hollín tiene una gran influencia en la temperatura de la llama. De hecho, como mostrado en la Figura 37, cuando la radiación es tomada en cuenta,

el pico máximo de temperatura disminuye alrededor de 250 K, de 2250 K a casi 1900 K. Dado que el modelo de radiación utilizado aquí no resuelve la ecuación de transferencia de calor radiativa (RTE), es posible que las variaciones de temperatura debidas a la radiación de hollín no estén descritas adecuadamente. Sin embargo, los resultados obtenidos son muy semejantes a los experimentales (Mahmoud et al., 2018). En general, al no considerar en su formulación la reabsorción, el modelo de radiación ópticamente delgada tiende a predecir inadecuadamente los valores pico de temperatura (Dasgupta et al., 2014). Además, este modelo también tiende a predecir valores inferiores de temperatura en la mayor parte de la región aguas abajo de la llama, lo que podría ser una razón para la diferencia de temperatura observada al inicio de la llama. Un aspecto importante para resaltar es que las variaciones en el campo de temperatura afectan a los campos de hollín, lo que como resultado modifica la transferencia de calor por radiación, y, en consecuencia, cambia de nuevo el perfil de temperatura. Este fenómeno es visto en el perfil de hollín, el cual, solo por el efecto de la radiación, aumenta de 175 a 190 ppb (Figura 37).

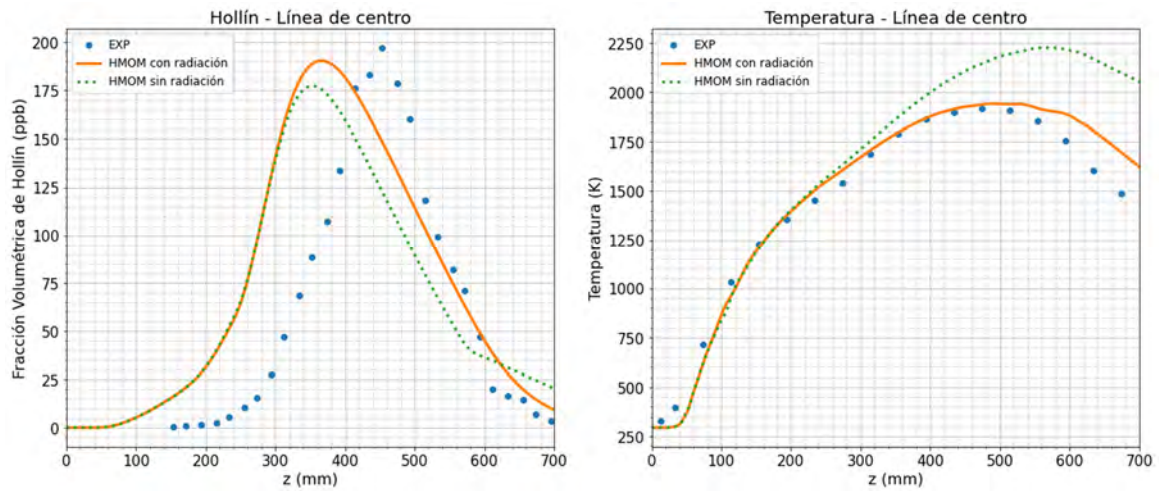


Figura 37. Efecto de la radiación en la fracción volumétrica de hollín y temperatura a lo largo de la línea de centro de la llama.

5.1.6. Análisis paramétrico

Todos los PAH que coalescen entre sí tienden a formar hollín. No obstante, cabe señalar que, debido a que el efecto de este mecanismo es generalmente sobredimensionado, es posible emplear un factor de adherencia para disminuir la tasa de nucleación (Blanquart y Pitsch, 2009). Esto permite reducir los valores máximos (pico) de hollín, lo que conduce a resultados más cercanos a los datos experimentales. Otro parámetro de los modelos de hollín que influye en las predicciones asociadas es el factor estérico α , presente en el término fuente de crecimiento superficial. Existen diferentes formulaciones para este factor, incluyendo la propuesta por Appel et al. (2000), la cual es utilizada aquí. No obstante, en varios estudios anteriores, para ajustar las predicciones de hollín, valores constantes de α han sido también utilizados. Dworkin et al. (2006) utilizaron, por ejemplo, un factor α de 0.078, mientras que Dasgupta et al. (2014) emplearon un factor de 1. Finalmente, como en el trabajo de Guo et al (2004), otros factores que suelen ajustarse son las tasas de reacción tanto para el crecimiento superficial como para la oxidación.

El ajuste en los parámetros de los modelos de hollín referidos es necesario debido a que estos modelos fueron formulados inicialmente para llamas

laminares y configuraciones de flujo específicas. Por lo tanto, para modelar llamas turbulentas difusivas es necesario ajustar de estos parámetros. Así, para evaluar la influencia de estos parámetros empíricos en los perfiles de hollín predichos, un estudio paramétrico usando el modelo MOMIC (ya que es el menos costoso de todos los modelos detallados estudiados) ha sido realizado. Más específicamente, para evaluar la influencia en el hollín formado del factor estérico α , presente en los términos fuente de crecimiento superficial y oxidación, y del factor de adherencia γ , presente en el término fuente de nucleación, la fracción de volumen de hollín integrada radialmente β fue utilizada. Los principales resultados obtenidos de las referidas evaluaciones son ilustrados en la Figura 38.

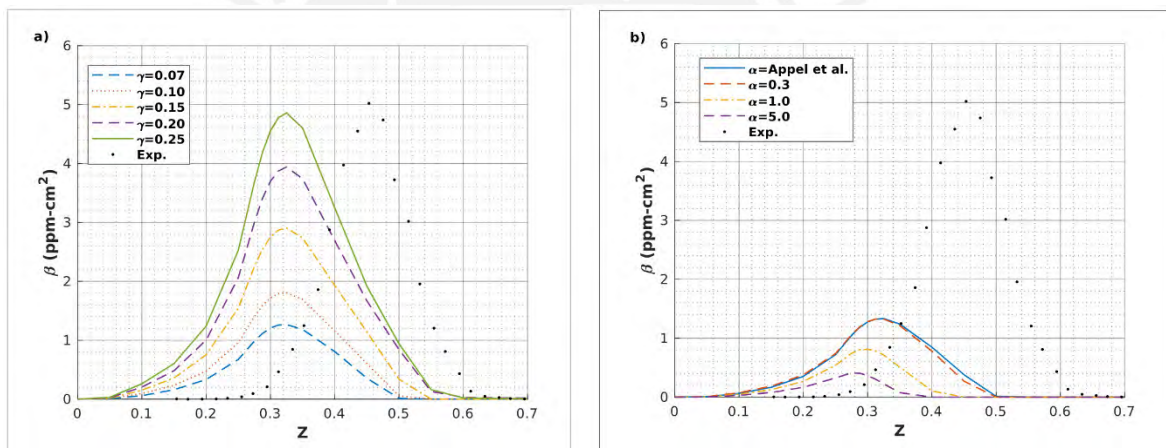


Figura 38. Estudio paramétrico realizado al método MOMIC

Como observado de la Figura 38, las variaciones en el factor de adherencia solamente incrementan el valor pico de hollín, pero no cambian la posición axial de este. Mientras que, en el caso del factor estérico α , este cambia ligeramente la posición axial del pico de hollín, arrastrándolo en la dirección del final de la llama. En los otros modelos de formación de hollín, a fin de poder capturar el valor pico de hollín, ajustes similares en estos parámetros han sido realizados.

5.2. CONTEXTO LES

Un interés particular en este trabajo es el modelamiento, con un alto grado de fidelidad y acorde con el estado del arte, de configuraciones geométricas

complejas. Así, diversas simulaciones LES de una configuración de flujo reactivo tipo bluff-body fueron realizadas. Más específicamente, como indicado en el Capítulo 4, las simulaciones tipo LES involucraron una llama turbulenta difusiva tipo bluff-body de Adelaida ENB 1 (Rowhani et al., 2021). Los principales resultados obtenidos para esta configuración de flujo son discutidos en esta sección.

5.2.1. Generación de Flamelets

A diferencia de la librería de flamelets creadas para las simulaciones RANS, estos flamelets han sido desarrollados de forma que permitan su utilización por el método FPV, detallado en la Sección 2.3.2. Así, mediante el uso del software FlameMaster (Pitsch, 2007), empleando el mecanismo de cinética química detallado ABF (Appel et al., 2000), y utilizando una definición convencional para la variable de progreso (suma de fracciones máscas de CO , CO_2 , H_2 y H_2O)(Pitsch & Ihme, 2005), la librería de flamelets fue creada. Los flamelets creados están representados mediante la denominada curva en forma de S. Estas curvas tienen tres ramas de solución, (i) la rama superior de combustión estable, (ii) la rama media inestable de estados parcialmente apagados, y (iii) la rama inferior de estados completamente apagados (extintos). El punto de inflexión entre las ramas superior e intermedia ocurre en la tasa de disipación escalar estequiométrica, que corresponde al límite de extinción y es aproximadamente $253 \frac{1}{s}$ en el caso considerado en este trabajo. Un total de 100 flamelets fueron creados para diferentes tasas estequiométricas de disipación escalar, involucrando valores desde $10^{-4} \frac{1}{s}$ hasta $253 \frac{1}{s}$ (el punto de inflexión). Estos flamelets no tienen defecto de entalpía, lo que implica que el efecto de la radiación no fue considerado. Una vez creada, la librería de flamelets fue procesada aplicando una PDF adecuada mediante las librerías del solver *FPV Foam* (Xian, 2019). Como medio de ilustración, la Figura 39 muestra los flamelets creados para la temperatura y para las diferentes especies presentes en los modelos de formación de hollín considerados.

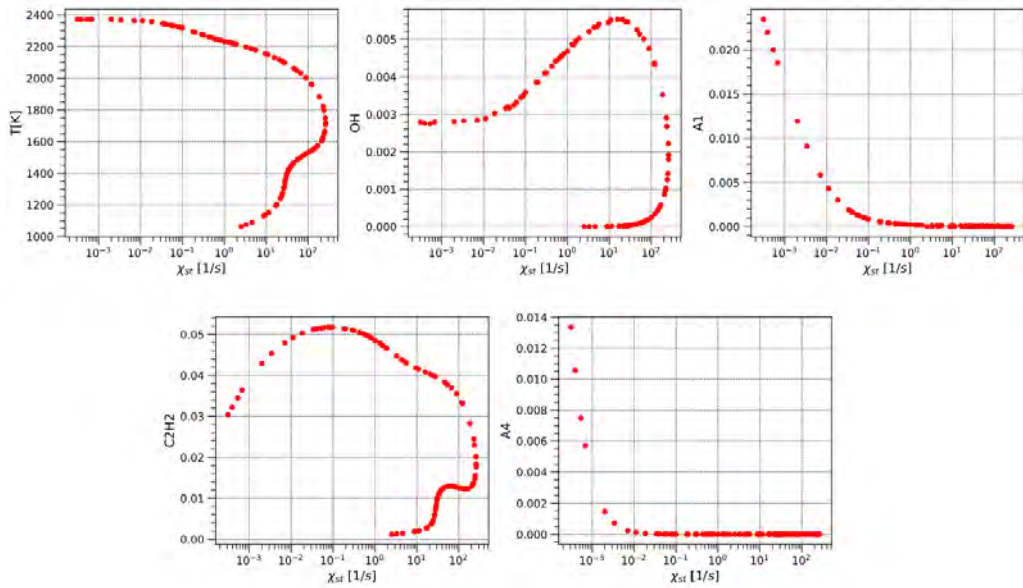


Figura 39. Librería de flamelets de T y fracción másica de C_2H_2 , OH, A1 (C_6H_6) y A4 ($C_{16}H_{10}$) como función de la tasa estequiométrica de disipación escalar.

5.2.2. Estudio de calidad de malla

Para realizar simulaciones LES aceptables, de acuerdo con el estado del arte, es necesario utilizar una malla computacional lo suficientemente refinada que sea capaz de (i) describir las capas límites próximas a las regiones de pared y (ii) resolver, aproximadamente, el 80% de las escalas del flujo turbulento (Pope, 2000). Con esta finalidad, una vez que esta es la región del flujo que presenta las mayores velocidades y, por lo tanto, requiere los menores elementos de malla, sólo el ducto de combustible (4.6 mm de diámetro interno) del quemador tipo bluff-body fue inicialmente modelado. El flujo turbulento en la descarga del ducto de combustible determina el comportamiento fluidodinámico de la llama. Por lo tanto, es necesario que este flujo turbulento sea descrito adecuadamente. Para que esto ocurra, un y^+ inferior a 1 es un requerimiento en las simulaciones LES. Para valores de y^+ mayores a 1, modelos de tratamiento de pared son requeridos. En este trabajo, usando la herramienta *snappyHexMesh*, descrita en la Sección 4.3.2, 2 refinamientos de malla adicionales fueron realizados en las regiones de pared, logrando un y^+ de alrededor de 0.8.

Para verificar las simulaciones numéricas LES del ducto de combustible realizadas, el estudio realizado por den Toonder & Nieuwstadt (1997) fue tomado en consideración. La data experimental extraída de este trabajo es para un número de Reynolds de 17800. Sin embargo, de acuerdo con las otras mediciones experimentales realizadas en el trabajo de referencia para Reynolds menores, la variación entre resultados es pequeña, por lo que estos datos a un Reynolds de 17800 han sido usados como medio de comparación en este trabajo. Así, el perfil de velocidad en términos de los parámetros adimensionales y^+ y u^+ en la región de la capa límite es mostrado en la Figura 40a. En esta figura, la curva que describe la ley de pared y la ley de la capa logarítmica son también mostrados con líneas discontinuas. En la subcapa viscosa ($0 < y^+ < 5$), los resultados obtenidos numéricamente aquí concuerdan con la teoría, $y^+ = u^+$. Mientras que en la región logarítmica ($y^+ > 30$), los resultados varían conforme a los experimentos. En la Figura 40b, el perfil de velocidad adimensional u^+ en función de la distancia con respecto a la pared es mostrado. Como observado, la velocidad tiene el perfil típico de un flujo turbulento (i.e., alargado en la punta). Adicionalmente, contrastando con los resultados experimentales, las discrepancias son pequeñas. Finalmente, en la Figura 40c, las fluctuaciones de la velocidad adimensional radial y la velocidad adimensional axial son comparados con los resultados experimentales. Como puede notarse en esta figura, ambas fluctuaciones cuentan con el perfil esperado y de acuerdo con los datos experimentales. En particular, la fluctuación de la velocidad adimensional axial presenta su mayor valor (RMS $u^+ = 2.7$) en la zona cercana a la pared, y la velocidad adimensional radial presenta su valor máximo (RMS $u^+ = 1$) en el centro del ducto.

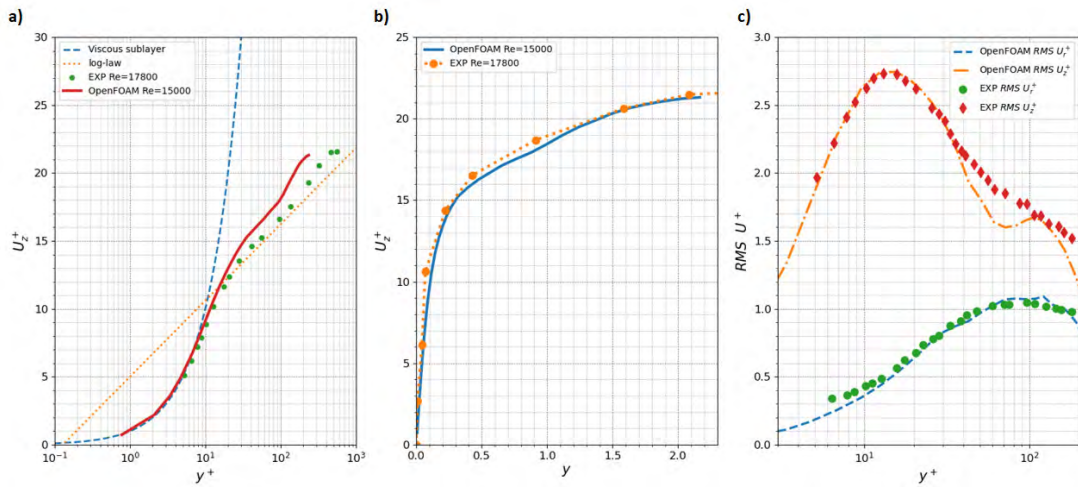


Figura 40. a) Perfil de velocidad $u +$ en la capa límite en función de $y +$. b) Perfil de velocidad $u +$ en función de la distancia a la pared. c) Fluctuaciones de velocidad $u +$ en función de $y +$.

Una vez simulado el ducto de combustible, la configuración del quemador tipo bluff-body fue simulada en condiciones inertes (sin reacción química). La longitud total del dominio computacional fue truncada a 400 mm por encima de la salida del jet de combustible, ya que, al no ser una simulación reactiva, los perfiles de velocidad y fluctuaciones de esta más allá de esta región son constantes. En LES no existe el concepto de independencia de malla como tal. Aun así, un estudio de calidad de malla fue realizado usando 3 mallas diferentes, siendo los tamaños de los elementos más pequeños de 0.08, 0.15 y 0.2 mm situados en la descarga de combustible. En este caso, debido a que esta es la zona crítica originada por la alta velocidad del combustible, los elementos más pequeños están situados en la pared interior del bluff-body y cercanos a la descarga del combustible.

En la Figura 41, los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas realizadas usando las 3 mallas consideradas son mostrados. En particular, esta figura muestra los perfiles de velocidad axial y radial en la línea de centro y en 3 posiciones axiales (alturas) por encima de la descarga del jet central. Como notado, a lo largo de la línea de centro (Figura 41, plots del lado izquierdo), las 3 mallas estudiadas producen resultados casi idénticos con respecto a la velocidad

axial, es decir, las tres predicen una velocidad de descarga de entre 39 y 40 m/s (2% de diferencia). En el caso de la velocidad radial, mayores diferencias son percibidas (5% de diferencia). Esto es debido, principalmente, al orden de magnitud de la escala del gráfico, ya que la velocidad está en torno a 0 m/s, teniendo un pico de 0.20 m/s. A pesar de esto, las dos mallas más refinadas tienden a una diferencia de menos de 1%, lo que es un indicio de que la malla más refinada (0,08 mm) puede ser usada en las simulaciones LES.

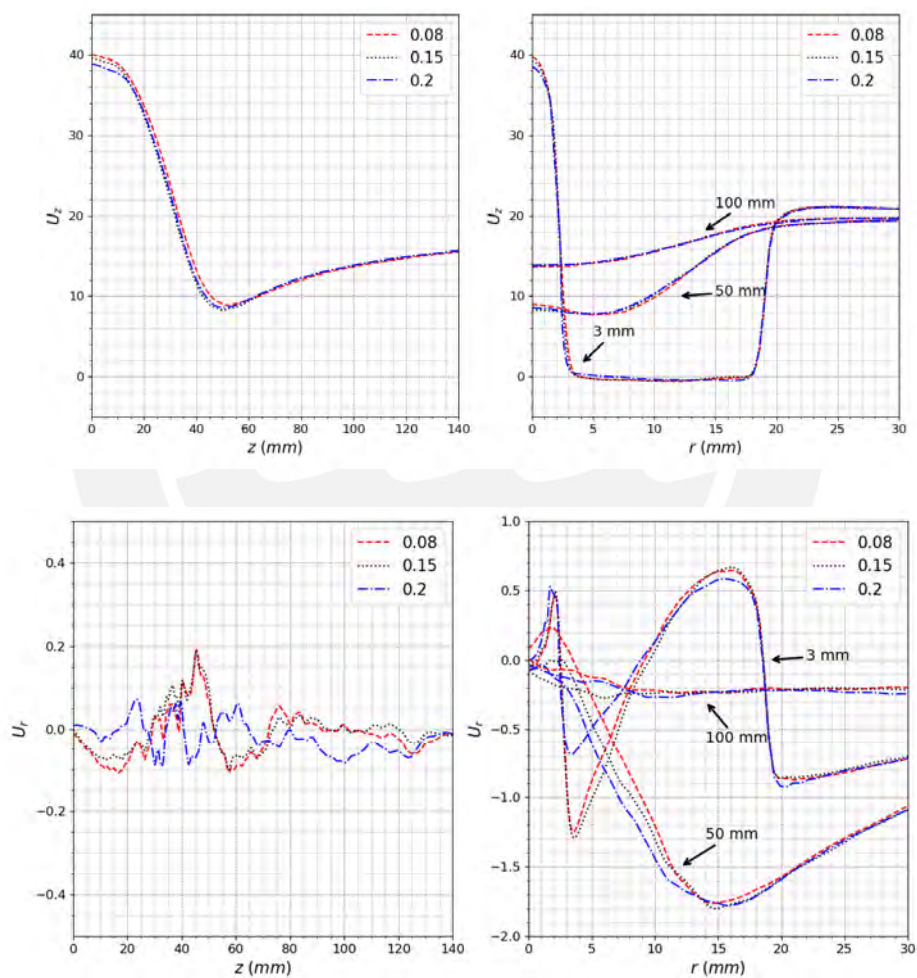


Figura 41. Perfiles axiales a lo largo de la línea de centro (lado izquierdo) y radiales en diferentes posiciones axiales (lado derecho) de las velocidades U_z y U_r en m/s.

Similarmente, la Figura 42 muestra perfiles axiales, a lo largo de la línea de centro (lado izquierdo), y radiales, en diferentes posiciones axiales (lado

derecho), de las fluctuaciones de velocidad U_z y U_r . De esta figura es observado que, en el caso de la malla con elemento más pequeño de 0.2 mm, los valores de las fluctuaciones difieren en 5 % con respecto a las otras dos mallas más refinadas. Además, los resultados con las dos mallas más refinadas ya no cambian en demasía (menos de 1% de diferencia). En consecuencia, una malla de 0,08 mm como elemento más pequeño fue seleccionada para las simulaciones LES realizadas en este trabajo. Esta malla fue generada considerando el dominio computacional completo, de 800 mm por encima de la descarga del jet de combustible, obteniéndose una cantidad total de 10.3 millones de elementos. Los resultados LES obtenidos con esta malla computacional son discutidos en las siguientes secciones.



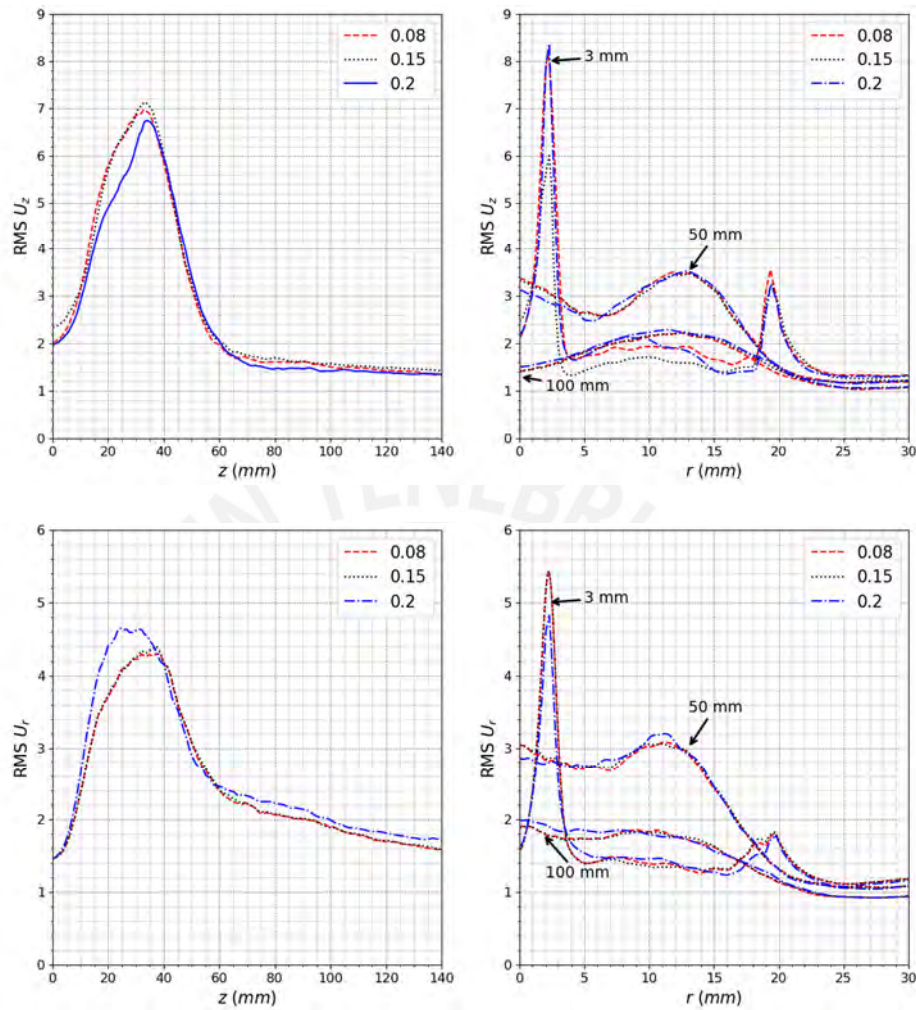


Figura 42. Perfiles axiales a lo largo de la línea de centro (lado izquierdo) y radiales en diferentes posiciones axiales (lado derecho) de las fluctuaciones de velocidad U_z y U_r en m/s.

5.2.3. Campos de velocidad, tensores de Reynolds y temperatura

Los campos instantáneo y medio de velocidad axial son mostrados en la Figura 43. La turbulencia de la llama puede ser apreciada en el campo instantáneo, donde el aire de co-flujo tiene una velocidad media de 20 m/s (color naranja) con ligeras fluctuaciones positivas y negativas (color rojo y amarillo). Al igual que en los datos experimentales (Rowhani et al., 2022), la velocidad axial máxima del flujo (36 m/s) está situada en la descarga del chorro de combustible. También es notado de la Figura 43 que la parte final del chorro de combustible está situada

entre 0.05 y 0.08 m, aproximadamente, lo cual concuerda con las simulaciones RANS realizadas por Rowhani et al. (2022), donde fue obtenida para la zona de recirculación una altura de 0.06 m. La zona de recirculación del flujo es más apreciable en el campo medio de velocidad, el cual muestra que esta zona está situada en los costados del chorro de combustible (color verde). La parte final de la zona de recirculación es denominada punto de estancamiento y su posición axial concuerda con los datos experimentales, donde el punto de estancamiento está situado a 0.75 m. En el caso inerte, el punto de estancamiento está situado mucho antes, alrededor de 0.04 m. De hecho, debido a la alta temperatura y baja densidad del flujo reactivo, el efecto de la reacción química hace que este punto sea desplazado aguas abajo. Esto concuerda con observaciones similares realizadas en estudios anteriores de bluff-body (Dally et al., 1998).

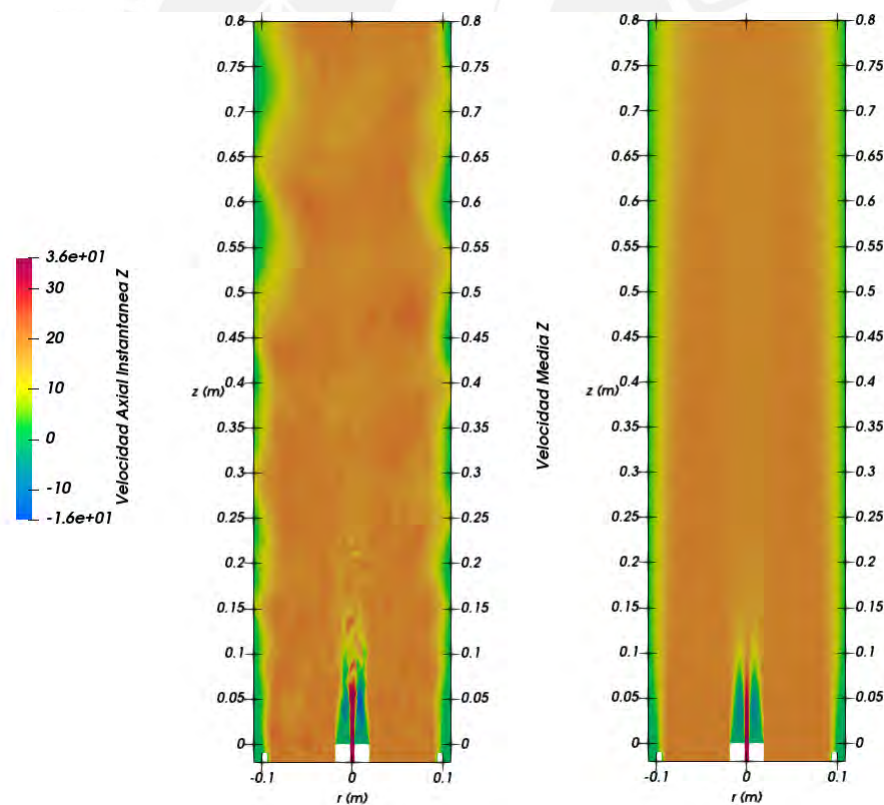


Figura 43. Campos instantáneo y medio de velocidad axial en m/s.

Los campos instantáneo y medio de velocidad radial mostrados en la Figura 44 indican que la velocidad radial instantánea oscila entre 24 y -24 m/s, mientras que la velocidad radial media presenta valores entre 3 y -3 m/s. En el campo

instantáneo, las zonas con valor positivo (rojo) y las zonas con valor negativo (azul) son las encargadas de formar los vórtices de recirculación. Mas específicamente, en concordancia con los datos experimentales (Rowhani et al., 2021), un vórtice interior y uno exterior son generados. En general, los campos obtenidos numéricamente tienen características típicas de flujos turbulentos tipo bluff-body.

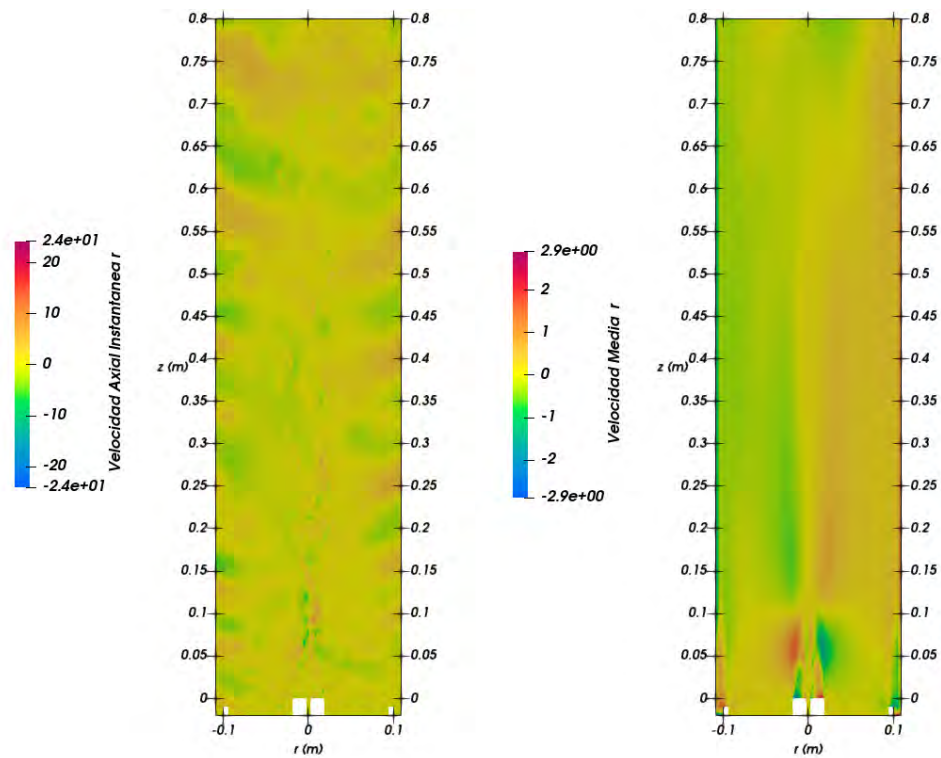


Figura 44. Campos instantáneo y medio de velocidad radial en m/s.

En la Figura 45, los campos medios de los tensores de Reynolds axial (ZZ), radial (ZR) y cruzado (RZ) son mostrados. En particular, los tensores axial y radial hacen referencia al cuadrado de las fluctuaciones de la velocidad en las direcciones axiales y radiales, respectivamente. La estructura de la llama predicha aquí es similar a las reportadas previamente en otros trabajos (Deng et al. 2017; Mueller et al. 2013). Más específicamente, esta llama presenta 3 zonas distintas, (i) una zona de recirculación inmediatamente después de la pared superior del bluff-body, (ii) una zona de cuello de alta tensión, y (iii) una región en forma de chorro con dirección a la salida del dominio. Los campos de los

tensores de Reynolds mostrados en la Figura 45 resaltan la zona del cuello de la llama, la cual está situada en una altura similar al punto de estancamiento. Adicionalmente, en el campo medio del tensor ZZ puede observarse que el valor máximo es de, aproximadamente, 100, es decir, que existen fluctuaciones de 10 m/s en esa zona del dominio. Lo mismo ocurre con el tensor radial RR, el cual presenta valores máximos de 16 m/s. Estos hallazgos concuerdan con estudios anteriores de configuraciones de flujo similares, donde la fluctuación máxima está situada en las capas de cizallamiento interiores originadas entre los vórtices exteriores e interiores. La comparación cuantitativa de los resultados obtenidos aquí con datos experimentales de estos estudios pasados es analizada en la Sección 5.2.6.

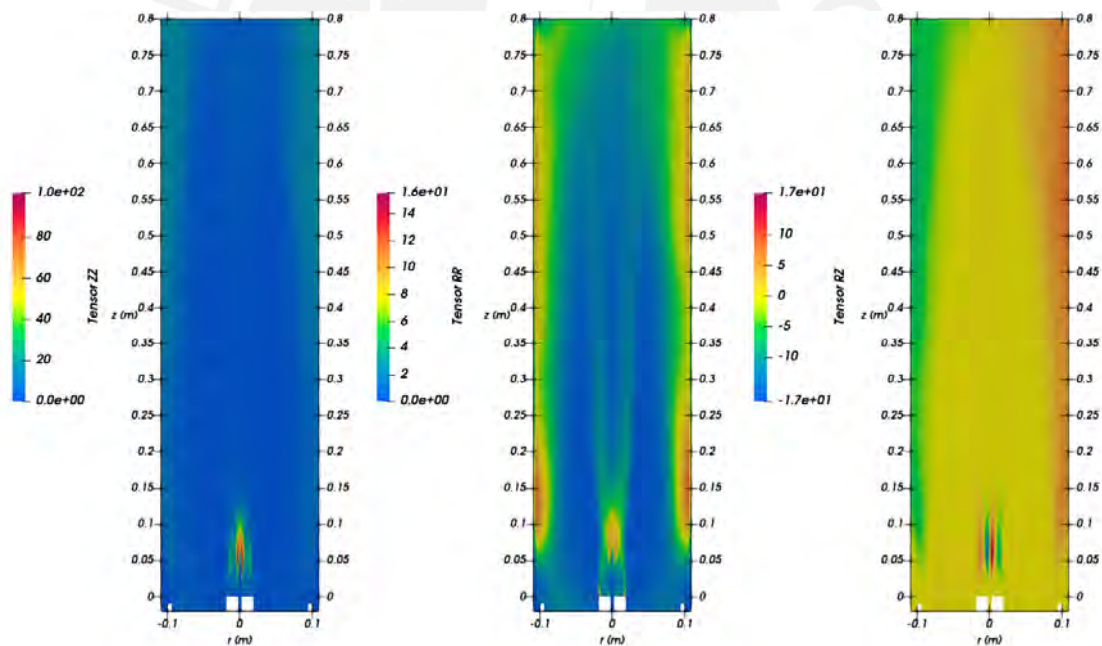


Figura 45. Campos medios de tensores de Reynolds ZZ, RR y RZ.

Finalmente, los campos instantáneo y medio de temperatura son mostrados en la Figura 46. La estructura de la llama, con sus respectivas 3 zonas, puede ser mejor apreciada en el campo medio de temperatura. También en el campo instantáneo puede apreciarse la forma en que la temperatura es difundida de forma turbulenta por todo el dominio. Los valores más altos de temperatura (2100

k) están situados en la zona más cercana a la descarga del jet de combustible (sobre la pared superior del bluff-body). Esto ocurre debido a que en esta zona el combustible es descargado y, por lo tanto, hay una alta fracción de mezcla. En la zona posterior al cuello, existe un valor elevado de temperatura que es coherente con este tipo de configuración de llama. Debido a la concentración de hollín, como ha sido constatado en el caso RANS, es de esperar que este campo de temperatura cambie una vez el efecto de la radiación sea incluido. Sin embargo, debido a la limitación del solver empleado, la radiación no ha sido considerada en estas simulaciones LES.

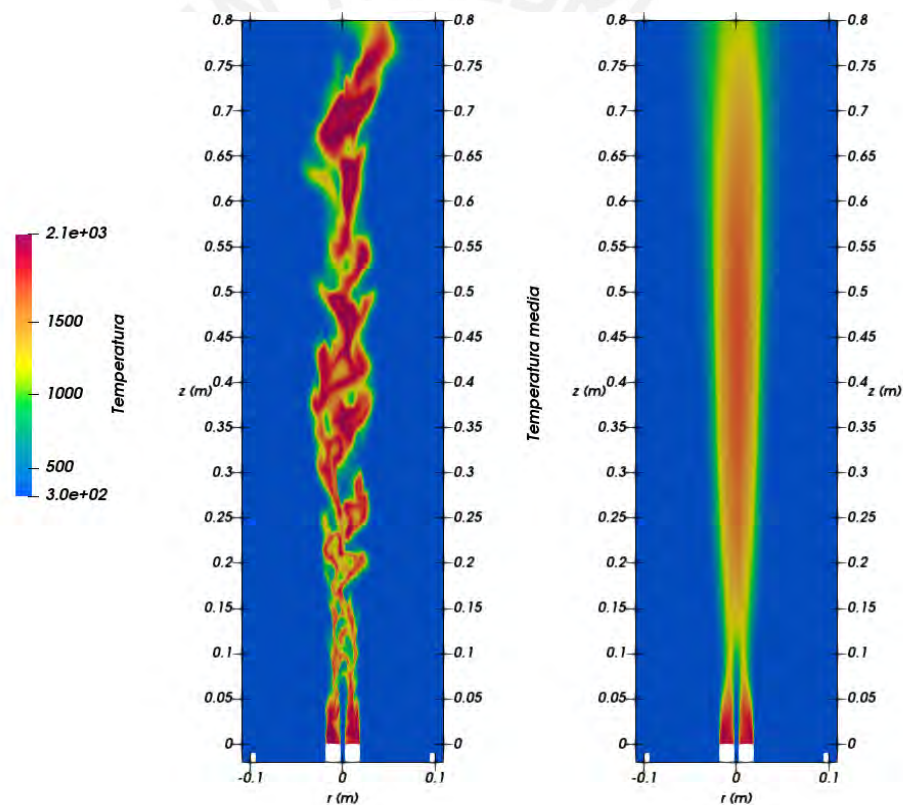


Figura 46. Campos instantáneo y medio de temperatura en K.

5.2.4. Campos de fracción másica de especies

En cuanto a las especies químicas comúnmente presentes en los modelos de formación de hollín, sus campos medios de fracción de masa son mostrados en la Figura 47. Según esta figura, el campo de fracción másica de C_2H_2 tiene valores máximos cerca de la zona de la capa de cizallamiento interior, por lo que

es de esperar que el efecto de crecimiento superficial de hollín sea mayor en esta región. Sin embargo, según Mueller et al.(2013), debido a los bajos tiempos de residencia de las fracciones de mezcla que incluyen C_2H_2 , el efecto de crecimiento superficial en este tipo de llamas es mucho menor que el asociado con la condensación. Es decir, el efecto de la condensación es mucho más importante en este tipo de flujos. Así mismo, en las zonas de recirculación cercanas al cuerpo del bluff-body, debido a que la fracción de mezcla es demasiado baja para los PAH y demasiado alta para el acetileno, la tasa de crecimiento superficial es muy pequeña. Por lo tanto, el mecanismo dominante en esta zona es el de nucleación y, seguidamente, el de coagulación. Esto es analizado con mayor profundidad en la Sección 5.2.5.

Como descrito en el caso RANS, el campo de OH tiene semejanza con la forma de la llama, teniendo una altura media por encima de 0.8 m, en concordancia con la de los datos experimentales (Rowhani et al., 2022). Los valores máximos de OH están situados en la zona de la capa de cizallamiento exterior al bluff-body y, como esperado de acuerdo con la configuración de llama, es extendido por toda la zona de recirculación. El O_2 , a su vez, tiene su mayor concentración en la zona de fracción de mezcla igual a 0, es decir, en la atmósfera y en toda la zona alejada de la llama, por tanto, no habrá hollín en estas regiones. La presencia de estas dos especies, OH y O_2 , reduce la concentración de hollín y su tamaño, especialmente en la zona de recirculación.

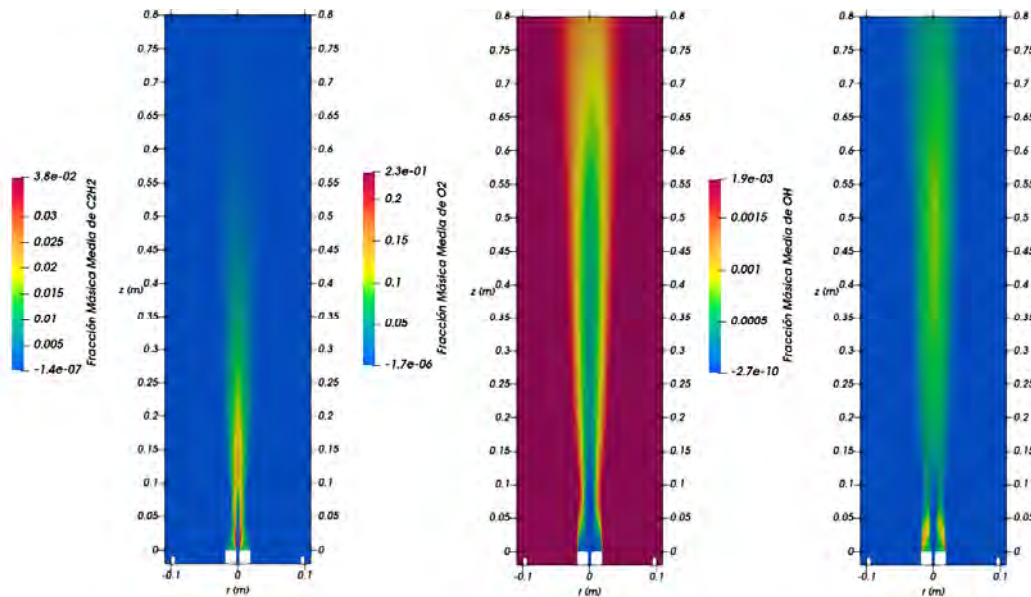


Figura 47. Campos medios de fracciones másicas de C_2H_2 , O_2 y OH .

En la actualidad, los PAH son considerados como los principales precursores del hollín. El aromático más grande que es capturado empleando el mecanismo cinético ABF usado en este trabajo es el de 4 anillos, pireno (A4). Es decir, este mecanismo no considera PAHs de mayor tamaño. Por lo tanto, en las simulaciones LES realizadas, solo el pireno (A4) ha sido considerado. De acuerdo con el estado del arte (Rigopoulos, 2019), esta es la especie precursora más importante en el modelamiento de hollín. En la Figura 48, los campos medios de fracción másica de los PAH que van desde 1 anillo (benceno) hasta 4 anillos (pireno) son mostrados. Como observado de esta figura, cualitativamente, estos 4 PAHs tienen la misma forma, mostrando valores máximos cerca de la capa de cizallamiento interior y en la zona siguiente al cuello del bluff-body en forma de chorro (semejante a una llama de menor tamaño). Por lo tanto, las tasas de nucleación, obtenidas a partir de estas especies químicas, no variarán mucho en forma, pero sí en orden de magnitud. Por lo tanto, no importa mucho cual PAH sea seleccionado como precursor de hollín principal, ya que este irá acompañado de un factor de adherencia o eficiencia de coalescencia que ajustará el orden de magnitud al valor deseado. Por lo tanto, en este trabajo sólo el A4 fue considerado como principal especie precursora del

hollín para la configuración bluff-body estudiada. En cuanto al efecto de la condensación, la zona que presenta una mayor tasa es aquella posterior a la del cuello de la llama. Una vez que la condensación es el principal mecanismo de crecimiento superficial, es esperado que los mayores valores de fracción volumétrica de hollín sean formados a partir de esta zona.

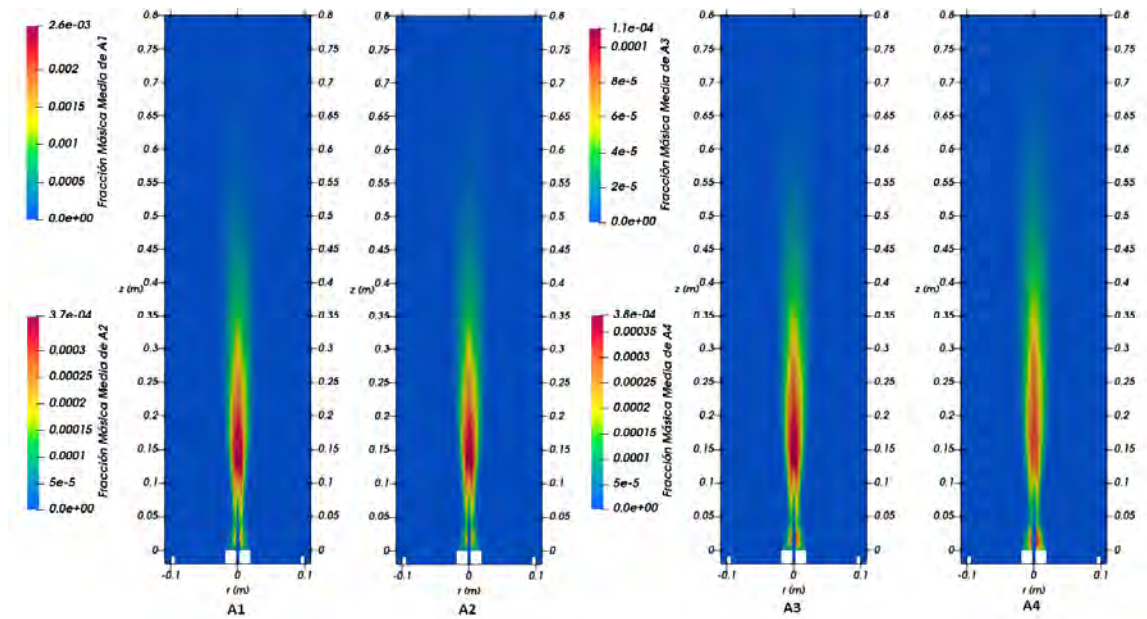


Figura 48. Campos medios de fracciones másicas de PAH: A1, A2, A3 y A4.

5.2.5. Campos de fracción volumétrica de hollín

Las primeras partículas de hollín son formadas cerca de la capa de cizallamiento interior, entre el chorro de combustible y la zona de recirculación, para luego ser convectadas por el flujo reactivo. Una parte del hollín nucleado entra en la zona de recirculación y luego es transportada de vuelta hacia la zona central de la llama. Como resaltado en la sección anterior, en las zonas de recirculación cercanas al cuerpo del bluff-body, la tasa de crecimiento es muy pequeña y el efecto de condensación sólo es significativo en las zonas próximas al chorro de combustible. Por lo tanto, la zona de recirculación influye más en el transporte del hollín que en su crecimiento, siendo las partículas de hollín más cercanas al bluff-body las de menor tamaño. Esto origina las principales diferencias entre los resultados obtenidos con los modelos de hollín, pues el modelo MOMIC, por

ejemplo, no predice las primeras partículas (pequeñas) de hollín. El modelo HMOM, por su parte, tiene una ecuación de transporte individual para la densidad del número de partículas, incluidas las más pequeñas. Por lo tanto, este modelo (junto con el seccional) es capaz de describir adecuadamente la cantidad de partículas de hollín de tamaño pequeño.

Los campos instantáneos de fracción volumétrica de hollín obtenidos con los 4 modelos considerados en este trabajo son mostrados en Figura 49. De esta figura, el modelo de 2 ecuaciones presenta un valor de hollín elevado cerca de la pared superior del bluff-body, lo que concuerda con los datos experimentales. Sin embargo, esto es debido únicamente a que su precursor (acetileno) está presente en mayor cantidad en la zona próxima (capa de cizallamiento) a la descarga del chorro de combustible. A su vez, el HMOM es el único capaz de predecir adecuadamente el hollín en la zona más cercana al bluff-body. El DSM también debería poder predecir este valor. Sin embargo, el hecho de no tener número suficiente de secciones para las partículas más pequeñas de hollín hace que el hollín pueda moverse de sección a sección más rápidamente. Esto implica que, para captar mejor las primeras partículas de hollín, un número mayor de secciones pueden ser necesarias. Además, al ser el HMOM formulado en dos variables, cuenta con una ventaja sobre el modelo seccional.

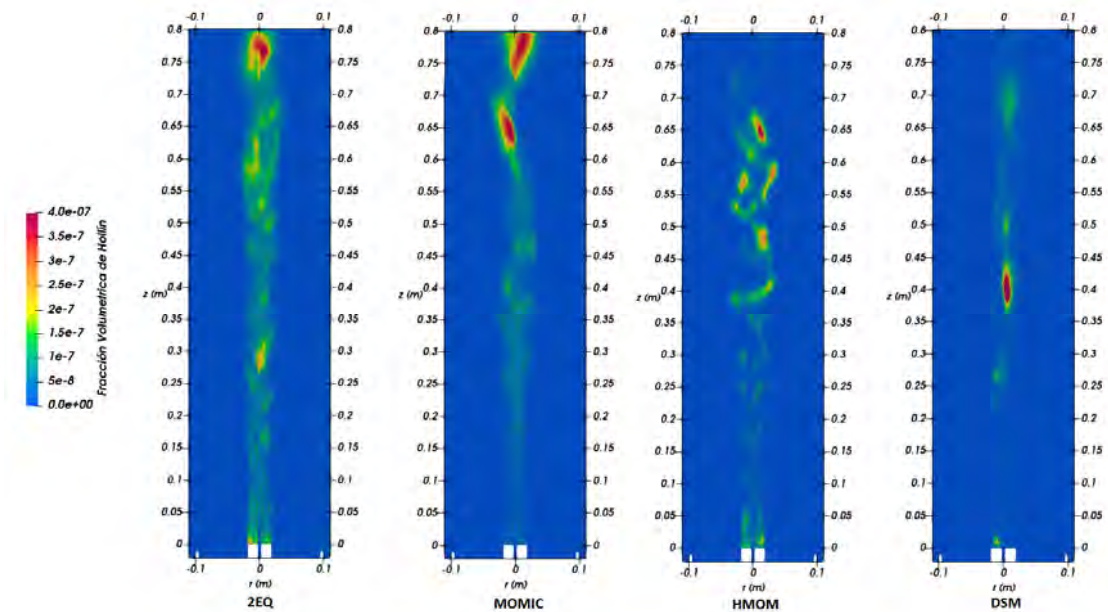


Figura 49. Campos instantáneos de fracción volumétrica de hollín obtenidos con los modelos de 2 ecuaciones, MOMIC, HMOM y DSM.

Los campos medios de fracción volumétrica de hollín, mostrados en la Figura 50, corroboran lo mencionado en el párrafo anterior. El HMOM es el único modelo capaz de describir adecuadamente el hollín formado en la zona de recirculación. Sin embargo, el hollín predicho numéricamente tiene un valor pico en la zona de la capa de cizallamiento, lo cual no fue reportado en estudios anteriores de bluff-body (Mueller et al., 2013). Es posible que el OH deba oxidar el hollín formado en esa zona o quizás el efecto del crecimiento superficial por acetileno esté teniendo una importancia mayor que la que debería. Dado esto, es posible que sea necesario ajustar en el futuro la tasa de crecimiento superficial o la de oxidación. En cuanto a los valores máximos de hollín, éstos están ubicados después del cuello de la llama, y presentan valores entre 0.4 y 0.65 m, lo cual concuerda con los datos experimentales. Sólo los modelos HMOM y DSM son capaces de describir adecuadamente esta posición de los picos de hollín. Los modelos de 2 ecuaciones y MOMIC, por su lado, predicen picos de hollín en posiciones muy por encima de lo esperado, incluso fuera del dominio computacional simulado. Esto significa que estos dos modelos necesitan ajustes en la tasa de oxidación. Nótese que, a fin de predecir niveles de hollín con un

orden de magnitud similar a los experimentos, el coeficiente de adherencia presente en la nucleación y las tasas de crecimiento y oxidación superficial fueron ajustados para cada caso. Como analizado en la Sección 5.1.6, estos ajustes no cambian la forma de los perfiles de hollín, sólo modifican su valor máximo.

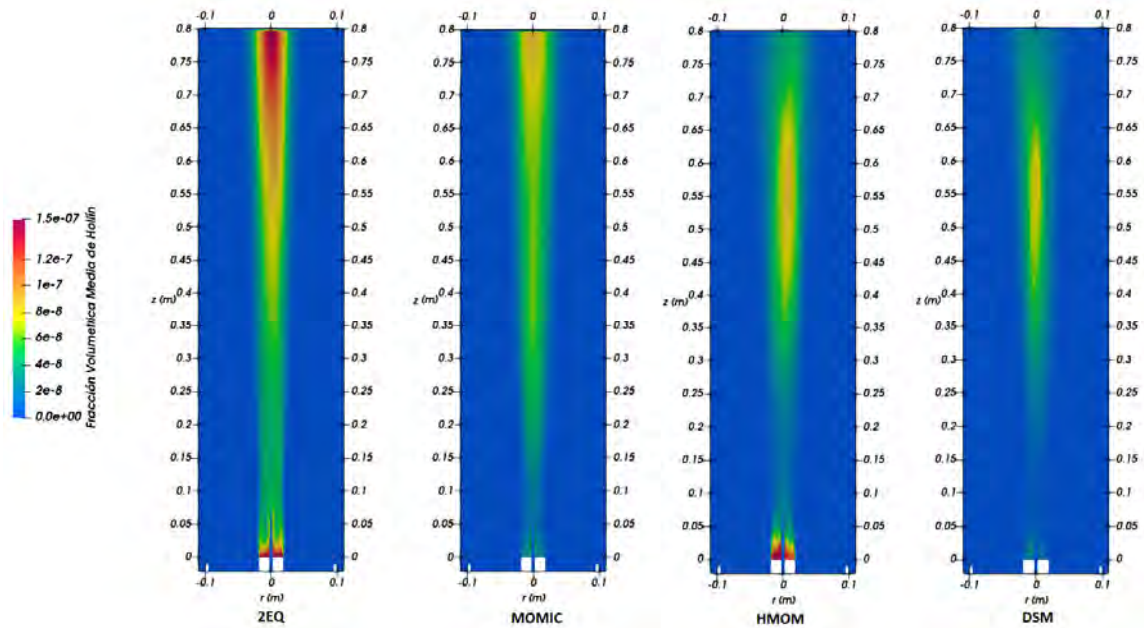


Figura 50. Campos medios de fracción volumétrica de hollín obtenidos con los modelos de 2 ecuaciones, MOMIC, HMOM y DSM.

5.2.6. Perfiles de velocidad y fluctuaciones de velocidad

Perfiles de velocidad axial en la línea de centro y en varias posiciones axiales (alturas) de la llama son mostrados en la Figura 51. Como observado en esta figura, en la línea de centro, entre 50 y 150 mm, los datos experimentales muestran un comportamiento no esperado, donde la velocidad sube y luego vuelve a bajar. Los resultados obtenidos numéricamente pudieron captar la tendencia de los datos experimentales de 0 a 70 mm y de 150 hasta el final del dominio, no siendo capaces de reproducir el comportamiento no esperado descrito anteriormente. Nótese que la velocidad axial de salida del chorro predicha tiene un valor muy similar al experimental, alrededor de 35 m/s, y luego

al final del dominio esta es mantenida alrededor de 17 m/s. En el caso de la velocidad axial en las diferentes posiciones axiales (alturas), sobre la descarga del chorro, evaluadas, los resultados numéricos obtenidos son próximos a los experimentales. Específicamente, en una posición axial de 4 mm (sobre la descarga del chorro), la zona de desprendimiento de la capa límite sobre el diámetro exterior del bluff-body presenta algunas discrepancias con los experimentos. Este es un hecho que podría resolverse con un mayor refinamiento de malla en la dirección azimutal de forma a describir mejor la capa límite. En las demás posiciones axiales, los perfiles de velocidad axial presentan tendencias similares a las de los datos experimentales.

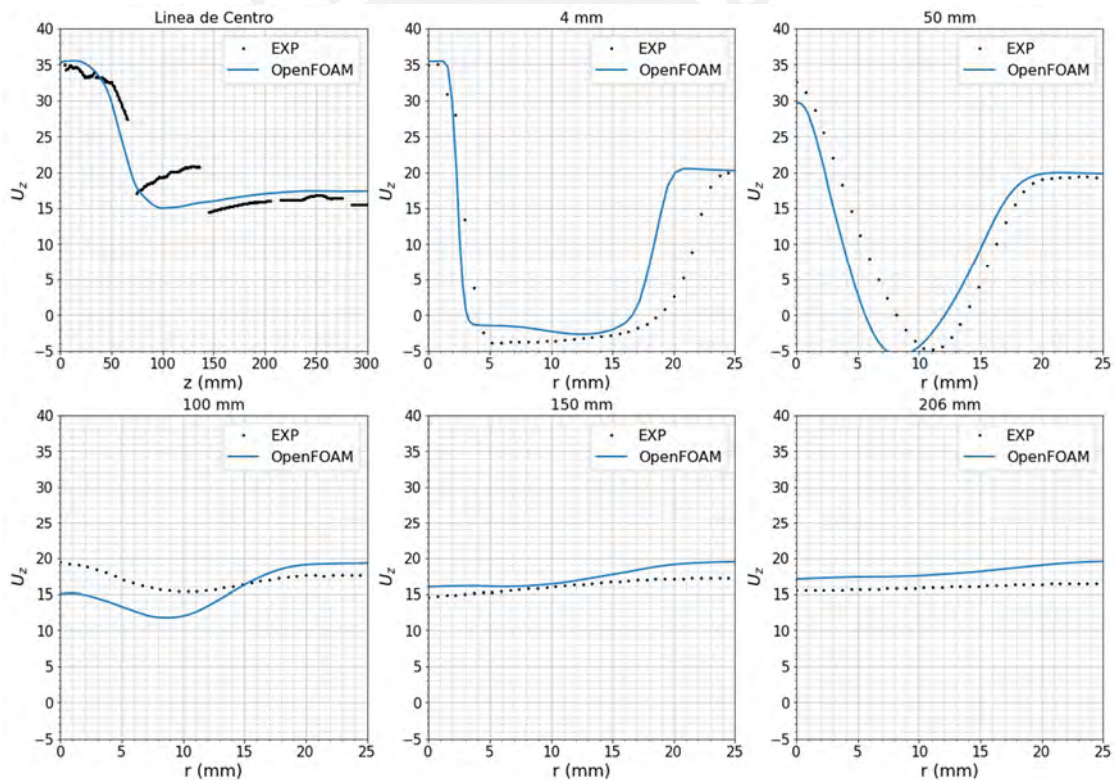


Figura 51. Perfiles de velocidad axial en m/s sobre la línea de centro y en diversas posiciones axiales (alturas) de la llama.

Observando los perfiles de fluctuación de velocidad axial mostrados en la Figura 52, a lo largo de la línea de centro de la llama, nótase que la descarga del chorro de combustible presenta un menor nivel de turbulencia. En concreto, numéricamente, fluctuaciones del orden de 2 m/s son obtenidas, mientras que el

experimento presenta fluctuaciones de alrededor de 6 m/s. Esto es debido a que el esquema numérico usado para aproximar la derivada temporal presenta algunas limitaciones. El esquema temporal usado aquí es del tipo Crank Nicolson, limitado a un factor de blending de 0.1 (pues valores mayores llevan a divergencia del solver), lo que origina que el esquema este comportándose como uno de primer orden, lo cual es muy difusivo. Esta difusión excesiva hace que la turbulencia disminuya más de lo debido en la descarga del chorro de combustible. A pesar de esta limitación, la parte restante del dominio sí adopta la forma de los datos experimentales, alcanzando una fluctuación máxima de alrededor de 9 m/s, y similar a los 8 m/s de los datos experimentales, y conservando la tendencia para el resto del dominio. En el caso de las fluctuaciones de la velocidad axial en las diferentes posiciones axiales (alturas) de la llama, la mayor diferencia está en la zona de descarga del combustible, en la posición axial de 4 mm. Como descrito, esto es debido a una limitación del propio solver, por lo que el pico máximo obtenido es de 5 m/s, mientras que el dato experimental es de 9.5 m/s. A pesar de ello, para las siguientes posiciones axiales, los resultados numéricos tienen un tendencia similar a los datos experimentales.

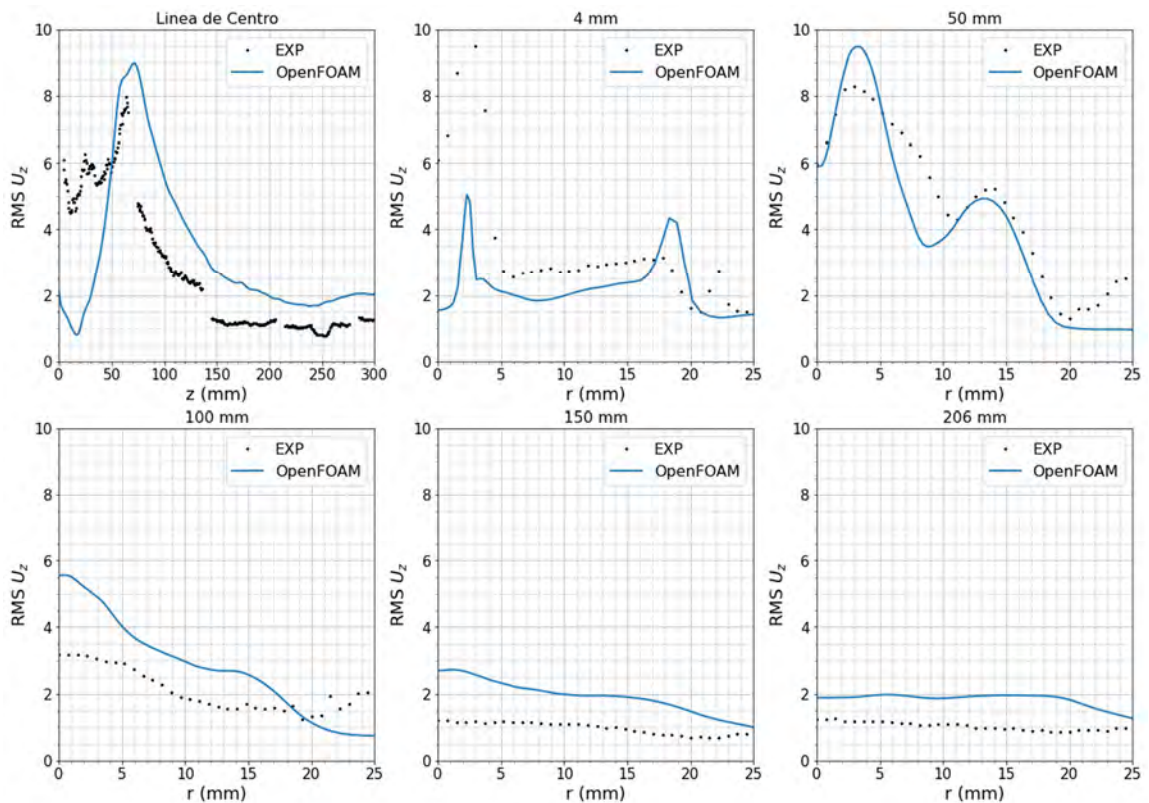


Figura 52. Perfiles de fluctuaciones de velocidad axial en m/s sobre la línea de centro y en diversas posiciones axiales (alturas) de la llama.

En la Figura 53, los perfiles de la velocidad radial a lo largo de la línea de centro y en diversas posiciones axiales (alturas) de la llama son mostrados. Respecto a la velocidad radial en la línea de centro, los valores numéricos son muy próximos a 0 m/s en todo el dominio, por lo que, debido al orden magnitud pequeño, no hay grandes diferencias con los valores medidos. En la posición axial de 4 mm por encima de la descarga de combustible, la velocidad radial predicha y los datos experimentales presentan las mayores discrepancias. De forma similar a lo ocurrido con la velocidad axial, estas mayores discrepancias están situadas en la capa límite exterior del bluff-body. De hecho, el valor máximo de la velocidad radial obtenido de las simulaciones es de alrededor de 2 m/s, mientras que los datos experimentales presentan 1 m/s como velocidad máxima. En el resto de las posiciones axiales evaluadas, la tendencia de los resultados numéricos es similar a la de los datos experimentales.

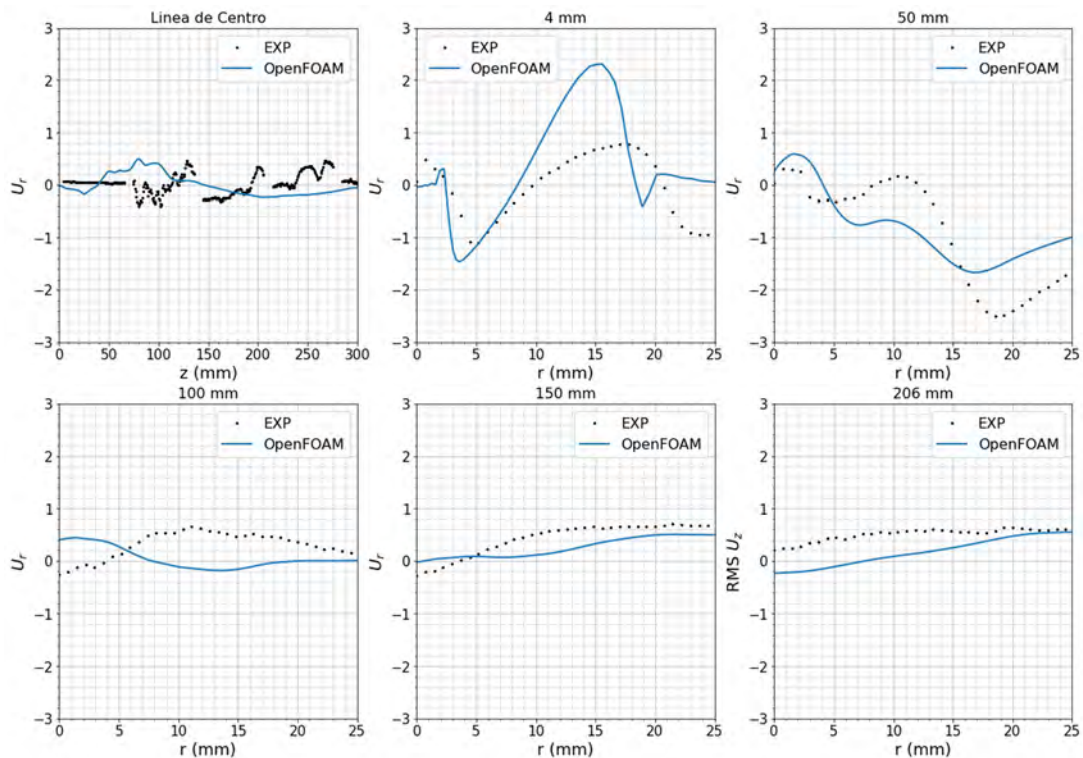


Figura 53. Perfiles de velocidad radial en la línea de centro y en diversas posiciones axiales (alturas) de la llama.

Finalmente, respecto a las fluctuaciones de la velocidad radial, Figura 54, el mismo problema en la descarga de combustible discutido anteriormente es observado. Al igual que en los resultados mostrados en la Figura 52, la turbulencia no es capturada adecuadamente en esta zona. Por ejemplo, en la descarga de combustible, los datos experimentales muestran un valor de 2 m/s, mientras que los resultados numéricos solamente 0.5 m/s. Sin embargo, a lo largo de la línea de centro y aguas abajo de la descarga de combustible, los resultados tienden a aproximarse más a la data experimental, con un valor pico similar de alrededor de 3 m/s. Además, en la posición radial de 4mm por encima de la descarga de combustible, el pico de la fluctuación de velocidad radial está situado en la misma posición (3.5 mm), pero este tiene un valor ligeramente superior (3 m/s) en comparación a la data experimental (2.25 m/s). En el resto de las posiciones axiales, las predicciones siguen la tendencia de los experimentos, a excepción de un pico presente en la posición axial de 50 mm, el cual duplica el valor de la fluctuación en ese punto.

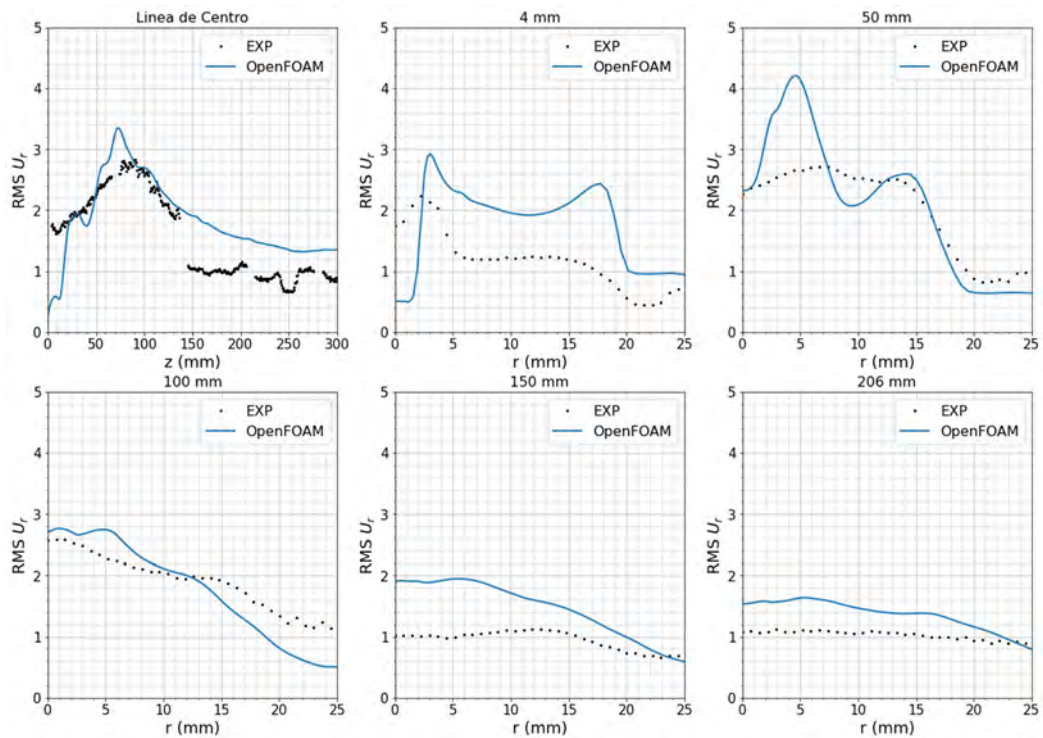


Figura 54. Perfiles de fluctuaciones de velocidad radial en la línea de centro y en diversas posiciones axiales (alturas) de la llama.

5.2.7. Perfiles de fracción volumétrica de hollín

En cuanto al hollín, los perfiles de fracción volumétrica de este predichos numéricamente usando los 4 modelos estudiados aquí son mostrados en la Figura 55. Respecto a los resultados a lo largo de la línea de centro, los únicos modelos que son capaces de predecir adecuadamente la concentración de hollín en zona inicial (de 0 hasta 150 mm) son el modelo HMOM y el modelo DSM, parcialmente. El modelo de 2 ecuaciones, a pesar de describir el pico generado por la formación de las primeras partículas, no predice bien el nivel de hollín en la parte restante del dominio. Esto ocurre debido a que su precursor de hollín es el acetileno, lo cual es una limitación del modelo. En el caso del modelo MOMIC, este tiene una formulación similar al HMOM. Sin embargo, este modelo no capta en absoluto la etapa inicial de formación. Esto ocurre debido, principalmente, a su limitación en la descripción de las primeras partículas de hollín formadas, y a que este modelo no considera la condensación como vía de crecimiento de

hollín, siendo este mecanismo más importante que el crecimiento superficial por acetileno en este tipo de llamas. En el caso del modelo DSM, este predice correctamente casi todo el dominio computacional, excepto en la zona inicial, donde un valor muy pequeño, solo 5 ppb comparado con los 20 ppb experimentales, es predicho. Esto ocurre debido a la tasa de condensación que necesita ser ajustada en este modelo. Es importante notar también que todos los modelos realizan predicciones ligeramente desfasados en relación con los resultados experimentales. Así, según los experimentos, las primeras partículas de hollín aparecen a partir de los 20 mm por encima de la descarga de combustible, pero en los resultados obtenidos numéricamente el hollín empieza a aparecer a los 40 mm. Esto puede estar asociado a las limitaciones observadas en la descripción de la dinámica del flujo reactivo y en la turbulencia en la descarga del chorro. En el caso del modelo MOMIC, este no permite capturar la caída del pico de hollín. Esto ocurre debido a que, para capturar el valor máximo de los datos experimentales, la tasa de oxidación fue reducida a través de la reducción del factor de eficiencia de colisión, de 0.13 a 0.013. Es de esperar que, modificando este parámetro, el hollín pueda decrecer y presentar el perfil de hollín deseado.

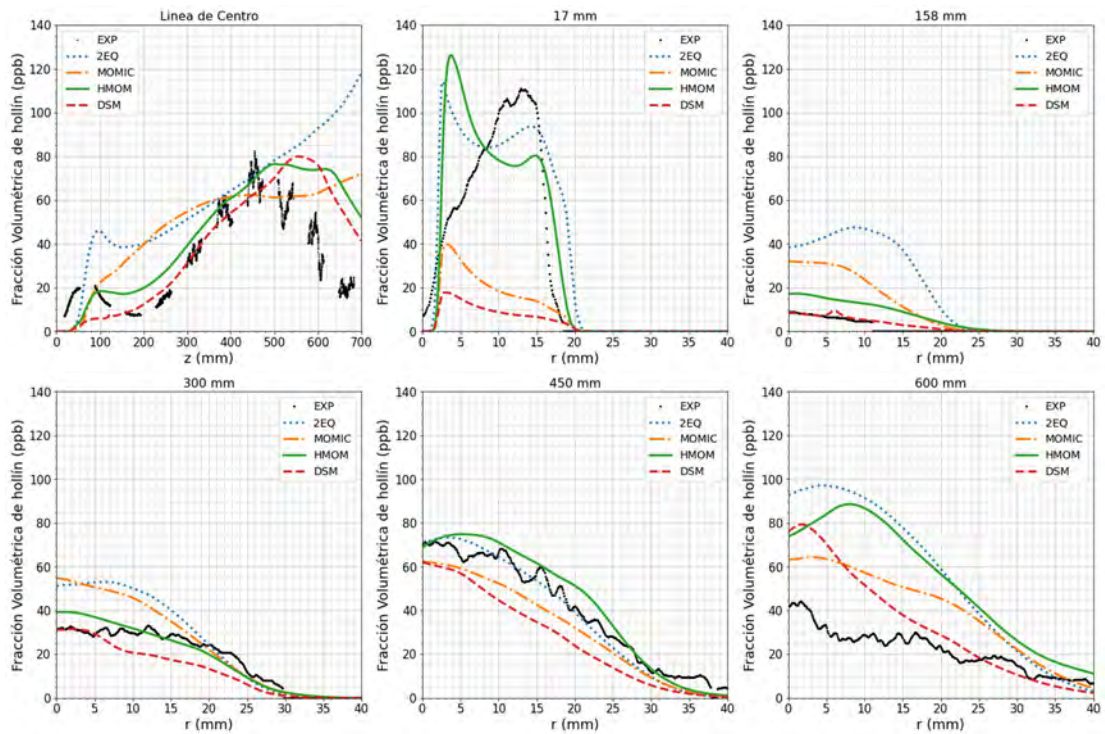


Figura 55. Perfiles de fracción volumétrica de hollín en la línea de centro y en diversas posiciones axiales (alturas) de la llama.

Los perfiles radiales de fracción volumétrica de hollín en las posiciones axiales consideradas (Figura 55) muestran que, según los experimentos, en la posición axial de 17 mm y en la zona cercana al chorro, hay poca concentración de hollín. Sin embargo, los resultados obtenidos con los modelos muestran un pico de hollín en esta zona. Esta discrepancia puede ser atribuida al hecho de que en esta zona la fluidodinámica no es descrita adecuadamente, y/o al crecimiento superficial debido a acetileno que alcanza una mayor importancia en esta zona. Con una turbulencia mayor (similar a la experimental), es de esperarse que el hollín sea convectado fuera de esta zona en la dirección de las regiones donde los picos experimentales de hollín son producidos. Los resultados mostrados en la posición axial de 17 mm muestran también que, debido a que éste captura las primeras partículas de hollín formadas, el modelo HMOM predice mejor el hollín formado. En el resto de las posiciones axiales evaluadas, las mejores predicciones son obtenidas con el modelo DSM, seguido del modelo HMOM. Ambos modelos son capaces de captar adecuadamente la formación de hollín

en diferentes posiciones axiales. Finalmente, a pesar de que el modelo DSM capta mejor la formación de hollín en las zonas más alejadas al bluff-body, el HMOM presenta una clara ventaja sobre el modelo DSM. Esto ocurre debido a que, de todos los modelos implementados aquí, el HMOM es el único capaz de modelar cadenas fractales de hollín (el resto de los modelos sólo considera esferas), además de su virtud de tener una ecuación de transporte especial sólo para las partículas nucleadas más pequeñas. Es de esperarse que un modelo seccional de dos coordenadas produzca mejores resultados, pero esto será objeto de futuras investigaciones.

5.2.8. Costo computacional

Las simulaciones LES son sumamente costosas debido, principalmente, al número grande de elementos de malla requerido para obtener un modelo aceptable, de acuerdo con el estado del arte, y a la cantidad de ecuaciones de transporte a resolverse (20 ecuaciones adicionales en el caso del modelo DSM). En este trabajo, las simulaciones LES fueron realizadas en un clúster que soporta trabajos MPI multi-nodo a través de una red Infiniband de 200 Gb/s. En las referidas simulaciones, 4 nodos de 48 núcleos cada uno, a una velocidad de 2.80 GHz, con 512 GB de RAM por nodo, haciendo un total de 192 núcleos y 2024 GB de RAM, fueron empleados. El costo computacional asociado a cada simulación, expresado en número de horas, es resumido en la Tabla 12. Cabe resaltar que este tiempo es un valor aproximado y varía en función de los parámetros de la simulación como los solvers lineales, esquemas numéricos y otras configuraciones.

Tabla 12. Costo computacional del uso de los modelos de hollín en contextos LES.

Modelo	Tiempo (horas)
Sin modelo	40.93
2EQ	54.67
MOMIC	59.35
HMOM	62.52
DSM	72.54



CONCLUSIONES

Para estudiar las principales especies químicas responsables por el nivel de hollín formado en flujos turbulentos reactivos, diferentes modelos de formación de hollín fueron desarrollados en este trabajo. Las simulaciones numéricas realizadas utilizando los modelos de hollín desarrollados involucraron abordajes tipo RANS y LES. Debido a que la mayor parte de los procesos físico-químicos que ocurren durante su formación involucran a las pequeñas escalas de turbulencia, el hollín es extremadamente complejo de predecir. Por lo tanto, los desafíos en este trabajo no fueron solamente aquellos relacionados con la implementación de los modelos detallados de hollín, sino que también aquellos relacionados con el modelamiento de la combustión y la turbulencia, así como la interacción entre estos modelos. Así mismo, las llamas turbulentas estudiadas en este trabajo, pertenecientes al “International Sooting Flames Workshop” (ISF), también representan desafíos importantes, pues estas han sido simuladas en múltiples ocasiones por varios investigadores, obteniéndose grandes diferencias entre los resultados. Incluso algunos parámetros básicos de las llamas son difíciles de predecir debido a su compleja dependencia al hollín y la radiación producida. Con el objetivo de predecir los niveles de hollín en configuraciones de flujo reactivo complejas, como son las llamas del ISF jet flame ENH 1 (RANS) y bluff-body flame ENB 1 (LES), varios avances en el entendimiento, implementación y uso de los modelos de hollín en flujos turbulentos reactivos fueron así discutidos en este trabajo.

Para el caso RANS, las predicciones de hollín estaban situadas inicialmente por debajo de los datos experimentales, por lo que fue necesario realizar ajustes en los modelos de turbulencia y hollín. Así mismo, los resultados RANS mostraron que la radiación es sumamente importante, pues esta cambia significativamente el perfil de hollín y de temperatura. Gracias a la radiación, el perfil de temperatura obtenido numéricamente fue casi idéntico al experimental. En el caso de las simulaciones LES, estas implicaron un desafío mucho mayor que las de RANS. Para este tipo de simulaciones es indispensable hacer una correcta descripción

de la fluidodinámica asociada, lo cual fue logrado en este trabajo gracias al generador sintético de turbulencia empleado, la herramienta snappyHexMesh usada para el refinamiento de malla en zonas focalizadas, y los ajustes de esquemas numéricos realizados. Aun así, los campos que caracterizaron el flujo turbulento reactivo presentaron discrepancias con respecto a los datos experimentales en la zona de descarga de combustible. A pesar de todo esto, a partir de la zona de recirculación formada en la estela del bluff-body, la fluidodinámica descrita es semejante a las mediciones experimentales.

Con respecto a la fracción volumétrica de hollín, en el caso RANS, a lo largo de la línea de centro, tanto el modelo MOMIC como el HMOM predicen relativamente bien el hollín formado. Sin embargo, en las diferentes posiciones axiales evaluadas, el HMOM describe mucho mejor la formación del hollín. Esto ocurre debido a que el método MOMIC no considera la condensación, haciendo que el crecimiento de hollín disminuya en las zonas con alta presencia de PAHs. En las simulaciones RANS, tanto axial como radialmente, el modelo DSM realizó predicciones aceptables del nivel de hollín formado. Sin embargo, debido a su limitada tasa de oxidación, en la zona final del dominio, la concentración de hollín aumentó considerablemente. En el caso de las simulaciones LES, los mejores resultados fueron obtenidos con el modelo HMOM. Gracias a su formulación en términos de dos variables, que lo hace capaz de modelar fractales de hollín, y a su ecuación de transporte adicional que le permite modelar las partículas de hollín de menor tamaño, el modelo HMOM es el mejor para predecir la formación de hollín en las llamas estudiadas. Después del HMOM, el segundo modelo que presentó los mejores resultados fue el DSM. Este modelo realiza también predicciones adecuadas de hollín, sin embargo, al no estar formulado para incluir fractales de hollín, este solamente incluye partículas esféricas. El modelo MOMIC es bueno para realizar predicciones iniciales. Sin embargo, este modelo no es la mejor opción debido a sus limitaciones de no captar la bimodalidad de la NDF y no considerar fractales de hollín. Finalmente, los PAH son las principales especies precursores de hollín, y los responsables del fenómeno de condensación, el cual es el mecanismo de crecimiento dominante en llamas tipo

bluff-body. Así, una correcta descripción de estos PAH producirá una mejor predicción del hollín. Los resultados mostraron también que no hay mucha diferencia entre los contornos de PAH, por lo que, siempre y cuando un coeficiente de adherencia adecuado sea utilizado, estos producirán perfiles de hollín similares.



REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANSYS Inc. (2021). *ANSYS Fluent, 2021a*.

Appel, J., Bockhorn, H., & Frenklach, M. (2000). Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C₂ hydrocarbons. *Combustion and Flame*, 121(1–2), 122–136. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(99\)00135-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(99)00135-2)

Baird, W. M., Hooven, L. A., & Mahadevan, B. (2005). Carcinogenic polycyclic aromatic hydrocarbon-DNA adducts and mechanism of action. *Environmental and Molecular Mutagenesis*, 45(2–3), 106–114. <https://doi.org/10.1002/em.20095>

Balthasar, M., & Frenklach, M. (2005). Detailed kinetic modeling of soot aggregate formation in laminar premixed flames. *Combustion and Flame*, 140(1–2), 130–145. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.11.004>

Balthasar, M., & Kraft, M. (2003). A stochastic approach to calculate the particle size distribution function of soot particles in laminar premixed flames. *Combustion and Flame*, 133(3), 289–298. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(03\)00003-8](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(03)00003-8)

Barlow, R. S., Karpetis, A. N., Frank, J. H., & Chen, J. Y. (2001). Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combustion and Flame*, 127(3), 2102–2118. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(01\)00313-3](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(01)00313-3)

Blanquart, G., & Pitsch, H. (2009). Analyzing the effects of temperature on soot formation with a joint volume-surface-hydrogen model. *Combustion and Flame*, 156(8), 1614–1626. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.04.010>

Bouaniche, A. (2020). *A hybrid stochastic-sectional method for the simulation of soot particle size distributions*. institut national des sciences appliquées.

- Bouaniche, A., Vervisch, L., & Domingo, P. (2019). A hybrid stochastic/fixed-sectional method for solving the population balance equation. *Chemical Engineering Science*, 209, 115198. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.115198>
- Boussinesq, J. (1897). *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes à grande section* (Gauthier-Villars et fils, Ed.).
- Brookes, S. J., & Moss, J. B. (1999). Measurements of soot production and thermal radiation from confined turbulent jet diffusion flames of methane. *Combustion and Flame*, 116(1–2), 49–61. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(98\)00027-3](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(98)00027-3)
- CFD direct. (2022). *OpenFOAM User Guide*. <https://Doc.Cfd.Direct/Openfoam/User-Guide-V10/Introduction>.
- Colket, M. B., & Hall, R. J. (1994). *Successes and Uncertainties in Modeling Soot Formation in Laminar, Premixed Flames*.
- Cuoci, A. (2010). *libOpenSMOKE*. <http://Creckmodeling.Chem.Polimi.It/>.
- Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T., & Ranzi, E. (2008). Kinetic modeling of soot formation in turbulent nonpremixed flames. *Environmental Engineering Science*, 25(10), 1407–1422. <https://doi.org/10.1089/ees.2007.0193>
- Curran, H. J. (2019). Developing detailed chemical kinetic mechanisms for fuel combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(1), 57–81. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.054>
- Dally, B. B., Masri, A. R., Barlow, R. S., & Fiechtner, G. J. (1998). Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Stabilized Nonpremixed Flames. *Combustion and Flame*, 114(1–2), 119–148. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(97\)00280-0](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00280-0)
- D'Anna, A., & Sirignano, M. (2019). *Detailed kinetic mechanisms of PAH and soot formation* (pp. 647–672). <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64087-1.00012-7>
- Dasgupta, A., Roy, S., & Haworth, D. C. (2014). Detailed computational modeling of laminar and turbulent sooting flames. *ACM International Conference Proceeding Series*. <https://doi.org/10.1145/2616498.2616509>

- Davis, J., Tiwari, K., & Novosselov, I. (2019). Soot morphology and nanostructure in complex flame flow patterns via secondary particle surface growth. *Fuel*, *245*, 447–457. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.02.058>
- den Toonder, J. M. J., & Nieuwstadt, F. T. M. (1997). Reynolds number effects in a turbulent pipe flow for low to moderate Re. *Physics of Fluids*, *9*(11), 3398–3409. <https://doi.org/10.1063/1.869451>
- Ducros, F., Nicoud, F., & Poinso, T. (1998). *Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity Models for Simulations in Complex Geometries*. <https://www.researchgate.net/publication/248366844>
- Dworkin, S. B., Bennett, B. A. V., & Smooke, M. D. (2006). A mass-conserving vorticity-velocity formulation with application to nonreacting and reacting flows. *Journal of Computational Physics*, *215*(2), 430–447. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.11.002>
- Favre, A. (1969). *Statistical equations of turbulent gases, Problems of hydrodynamics and continuum mechanics*. 231–266.
- Frenklach, M. (2002a). Reaction mechanism of soot formation in flames. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *4*(11), 2028–2037. <https://doi.org/10.1039/b110045a>
- Frenklach, M. (2002b). Method of moments with interpolative closure. *Chemical Engineering Science*, *57*(12), 2229–2239. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(02\)00113-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(02)00113-6)
- Frenklach, M., & Mebel, A. M. (2020). On the mechanism of soot nucleation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *22*(9), 5314–5331. <https://doi.org/10.1039/D0CP00116C>
- Frenklach, M., & Wang, H. (1991). Detailed modeling of soot particle nucleation and growth. *Symposium (International) on Combustion*, *23*(1), 1559–1566. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80426-1](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80426-1)

- Gallen, L., Felden, A., Riber, E., & Cuenot, B. (2019). Lagrangian tracking of soot particles in LES of gas turbines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4), 5429–5436. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.013>
- Gelbard, F., & Seinfeld, J. H. (1978). Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems. *Journal of Computational Physics*, 28(3), 357–375. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(78\)90058-X](https://doi.org/10.1016/0021-9991(78)90058-X)
- Gelbard, F., Tambour, Y., & Seinfeld, J. H. (1980). Sectional representations for simulating aerosol dynamics. *Journal of Colloid and Interface Science*, 76(2), 541–556. [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(80\)90394-X](https://doi.org/10.1016/0021-9797(80)90394-X)
- Glassman, I., & Yetter, R. A. (2008). *Combustion* (4th ed.). Academic Press.
- Guo, H., Liu, F., & Smallwood, G. J. (2004). Soot and NO formation in counterflow ethylene/oxygen/nitrogen diffusion flames. *Combustion Theory and Modelling*, 8(3), 475–489. <https://doi.org/10.1088/1364-7830/8/3/003>
- Henderson, A. (2007). *ParaView Guide, A Parallel Visualization Application*.
- Hoerle, C. A., & Pereira, F. M. (2019). Effects of CO₂ addition on soot formation of ethylene non-premixed flames under oxygen enriched atmospheres. *Combustion and Flame*, 203, 407–423. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.02.016>
- Holzmann, T. (2012). *CRECKFlameletModel*. <https://Holzmann-Cfd.Com/>.
- Ihme, M., & Pitsch, H. (2008). Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation. *Physics of Fluids*, 20(5), 1–21. <https://doi.org/10.1063/1.2911047>
- Issa, R. I., Gosman, A. D., & Watkins, A. P. (1986). The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme. *Journal of Computational Physics*, 62(1), 66–82. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90100-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(86)90100-2)
- Jones, W. P., & Launder, B. E. (1972). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(2), 301–314. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90076-2](https://doi.org/10.1016/0017-9310(72)90076-2)

- Kazakov, A., & Frenklach, M. (1998). Dynamic Modeling of Soot Particle Coagulation and Aggregation: Implementation With the Method of Moments and Application to High-Pressure Laminar Premixed Flames. *Combustion and Flame*, 114(3–4), 484–501. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(97\)00322-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00322-2)
- Kennedy, I. M. (1997). Models of soot formation and oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(2), 95–132. [https://doi.org/10.1016/S0360-1285\(97\)00007-5](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(97)00007-5)
- Kleidon, A. (2019). Energy Balance. In *Encyclopedia of Ecology* (pp. 50–63). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409548-9.00927-1>
- Kolmogorov, A. (1890). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, 434(1890), 9–13. <https://doi.org/10.1098/rspa.1991.0075>
- Launder, B. E., & Sharma, B. I. (1974). Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1(2), 131–137. [https://doi.org/10.1016/0094-4548\(74\)90150-7](https://doi.org/10.1016/0094-4548(74)90150-7)
- Leonard, A. (1975). *Energy Cascade in Large-Eddy Simulations of Turbulent Fluid Flows* (pp. 237–248). [https://doi.org/10.1016/S0065-2687\(08\)60464-1](https://doi.org/10.1016/S0065-2687(08)60464-1)
- Lilleberg, B., Christ, D., Ertesvåg, I. S., Rian, K. E., & Kneer, R. (2013). Numerical Simulation with an Extinction Database for Use with the Eddy Dissipation Concept for Turbulent Combustion. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91(2), 319–346. <https://doi.org/10.1007/s10494-013-9463-y>
- Liu, F., Guo, H., Smallwood, G. J., & Gülder, Ö. L. (2002). Effects of gas and soot radiation on soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73(2–5), 409–421. [https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(01\)00205-9](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00205-9)
- Mahmoud, R. (2020). *Development and Application of an Eulerian Density Function Methodology coupled to Flamelet Progress Variable Approach for the Simulation of Oxyfuel Combustion*. Technische Universität Darmstadt.

- Mahmoud, S., Nathan, G. J., Alwahabi, Z. T., Sun, Z. W., Medwell, P. R., & Dally, B. B. (2018). The effect of exit Reynolds number on soot volume fraction in turbulent non-premixed jet flames. *Combustion and Flame*, 187, 42–51. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.08.020>
- Maldonado Colmán, H., Cuoci, A., Darabiha, N., & Fiorina, B. (2022). A virtual chemistry model for soot prediction in flames including radiative heat transfer. *Combustion and Flame*, 238, 111879. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111879>
- Manrique, J., Celis, C., & Figueira da Silva, L. F. (2021). Non-Premixed Turbulent Combustion Modelling of a Bluff-body Flame Using a Flamelet Progress Variable Approach. *26th ABCM International Congress of Mechanical Engineering*.
- Marchisio, D. L., & Fox, R. O. (2005). Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36(1), 43–73. <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2004.07.009>
- Mercier, X., Carrivain, O., Irimiea, C., Faccinetto, A., & Therssen, E. (2019). Dimers of polycyclic aromatic hydrocarbons: the missing pieces in the soot formation process. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(16), 8282–8294. <https://doi.org/10.1039/C9CP00394K>
- MINEM. (2018). *Balance Nacional de Energia 2018*.
- Mueller, M. (2019). Soot Modeling for Gas Turbine Engines: Recent Developments, Remaining Gaps, and Emerging Needs. *ASME Turbo Expo* .
- Mueller, M., Blanquart, G., & Pitsch, H. (2009a). A joint volume-surface model of soot aggregation with the method of moments. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 I(1), 785–792. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2008.06.207>
- Mueller, M., Blanquart, G., & Pitsch, H. (2009b). Hybrid Method of Moments for modeling soot formation and growth. *Combustion and Flame*, 156(6), 1143–1155. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.01.025>

- Mueller, M. E., Chan, Q. N., Qamar, N. H., Dally, B. B., Pitsch, H., Alwahabi, Z. T., & Nathan, G. J. (2013). Experimental and computational study of soot evolution in a turbulent nonpremixed bluff body ethylene flame. *Combustion and Flame*, *160*(7), 1298–1309. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.02.010>
- Muller, H., Ferraro, F., & Pfitzner, M. (2013). Implementation of a Steady Laminar Flamelet Model for non-premixed combustion in LES and RANS simulation. *8th International OpenFOAM Workshop*.
- Netzell, K., Lehtiniemi, H., & Mauss, F. (2007). Calculating the soot particle size distribution function in turbulent diffusion flames using a sectional method. *Proceedings of the Combustion Institute*, *31*(1), 667–674. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.08.081>
- Our World in Data. (2022). *Share of primary energy from fossil fuels*.
- Pang, K. M., Karvounis, N., Walther, J. H., Schramm, J., Glarborg, P., & Mayer, S. (2017). Modelling of temporal and spatial evolution of sulphur oxides and sulphuric acid under large, two-stroke marine engine-like conditions using integrated CFD-chemical kinetics. *Applied Energy*, *193*, 60–73. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.02.020>
- Park, S. H., & Rogak, S. N. (2004). A novel fixed-sectional model for the formation and growth of aerosol agglomerates. *Journal of Aerosol Science*, *35*(11), 1385–1404. <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2004.05.010>
- Passalacqua, A., Heylmun, J., Icardi, M., Madadi, P., Bachant, P., & Hu, X. (2019). *OpenQBMM 5.0.0 for OpenFOAM 7*. Doi:10.5281/Zenodo.3471804.
- Patankar, S. V., & Spalding, D. B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, *15*(10), 1787–1806. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90054-3](https://doi.org/10.1016/0017-9310(72)90054-3)
- Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, *10*(3), 319–339. [https://doi.org/10.1016/0360-1285\(84\)90114-X](https://doi.org/10.1016/0360-1285(84)90114-X)

- Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press.
<https://doi.org/10.1017/CBO9780511612701>
- Pierce, C. D., & Moin, P. (2004). Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504(504), 73–97. <https://doi.org/10.1017/S0022112004008213>
- Pitsch, H. (2007). *FlameMaster v3.3.10: A C++ Computer Program for 0D Combustion and 1D Laminar Flame Calculations*.
<https://Web.Stanford.Edu/Group/Pitsch/FlameMaster.Htm>.
- Pitsch, H., & Ihme, M. (2005). An Unsteady/Flamelet Progress Variable Method for LES of Nonpremixed Turbulent Combustion. *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. <https://doi.org/10.2514/6.2005-557>
- Poletto, R., Craft, T., & Revell, A. (2013). A New Divergence Free Synthetic Eddy Method for the Reproduction of Inlet Flow Conditions for LES. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91(3), 519–539. <https://doi.org/10.1007/s10494-013-9488-2>
- Polonowski, C. J., Mueller, C. J., Gehrke, C. R., Bazyn, T., Martin, G. C., & Lillo, P. M. (2011). An Experimental Investigation of Low-Soot and Soot-Free Combustion Strategies in a Heavy-Duty, Single-Cylinder, Direct-Injection, Optical Diesel Engine. *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, 5(1), 2011-01–1812. <https://doi.org/10.4271/2011-01-1812>
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
<https://doi.org/10.1017/CBO9780511840531>
- Pratsinis, S. E. (1988). Simultaneous nucleation, condensation, and coagulation in aerosol reactors. *Journal of Colloid And Interface Science*, 124(2), 416–427. [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(88\)90180-4](https://doi.org/10.1016/0021-9797(88)90180-4)
- Rezvan, K. L. , B. N. J. , and F. M. (2002). *Soot formation codes*.
[Http://Combustion.Berkeley.Edu/Soot/Codes/Codes.Html](http://Combustion.Berkeley.Edu/Soot/Codes/Codes.Html).
- Richardson, L. (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*.

- Rigopoulos, S. (2019). Modelling of Soot Aerosol Dynamics in Turbulent Flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 103(3), 565–604. <https://doi.org/10.1007/s10494-019-00054-8>
- Rodriguez, S. (2019). *Applied Computational Fluid Dynamics and Turbulence Modeling*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-28691-0>
- Rowhani, A., Sun, Z., Medwell, P. R., Nathan, G. J., & Dally, B. B. (2021). Soot-flowfield interactions in turbulent non-premixed bluff-body flames of ethylene/nitrogen. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(1), 1125–1132. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.148>
- Rowhani, A., Sun, Z. W., Medwell, P. R., Alwahabi, Z. T., Nathan, G. J., & Dally, B. B. (2022). Effects of the Bluff-Body Diameter on the Flow-Field Characteristics of Non-Premixed Turbulent Highly-Sooting Flames. *Combustion Science and Technology*, 194(2), 378–396. <https://doi.org/10.1080/00102202.2019.1680508>
- SENAMHI. (2018). *SENAMHI: Emisiones de vehículos generan hollín en la atmósfera de Lima y Callao*.
- Smagorinsky J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91(3), 99–164. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1963\)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2)
- Smoluchowski, M. V. (1917). Mathematical theory of the kinetics of coagulation of colloidal systems. *Z. Phys. Chem.* 92, 129–168.
- Thomson, M., & Mitra, T. (2018). A radical approach to soot formation. *Science*, 361(6406), 978–979. <https://doi.org/10.1126/science.aau5941>
- Turns, S. R. (2000). *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications* (Vol. 1). McGraw-Hill.
- Valencia, S., Ruiz, S., Manrique, J., Celis, C., & Figueira da Silva, L. F. (2021). Soot modeling in turbulent diffusion flames: review and prospects. *Journal of the*

Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 43(4), 219.
<https://doi.org/10.1007/s40430-021-02876-y>

Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics Second Edition*. www.pearsoned.co.uk/versteeg

Wang, H. (2011). Formation of nascent soot and other condensed-phase materials in flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1), 41–67.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.09.009>

Weller, H. G., Tabor, G., Jasak, H., & Fureby, C. (1998). A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6), 620. <https://doi.org/10.1063/1.168744>

Wick, A., Frenklach, M., & Pitsch, H. (2020). Systematic assessment of the Method of Moments with Interpolative Closure and guidelines for its application to soot particle dynamics in laminar and turbulent flames. *Combustion and Flame*.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.01.007>

Xian, W. (2019). *FPV Foam*. <https://github.com/Weixian001/FPV Foam/>.

Yang, S., & Mueller, M. E. (2019). A Multi-Moment Sectional Method (MMSM) for tracking the soot Number Density Function. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(1), 1041–1048. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.107>

Zhang, M. (2019). Implementation of a two-equation soot model for sprayFoam. *Proceedings of CFD with OpenSource Software*.

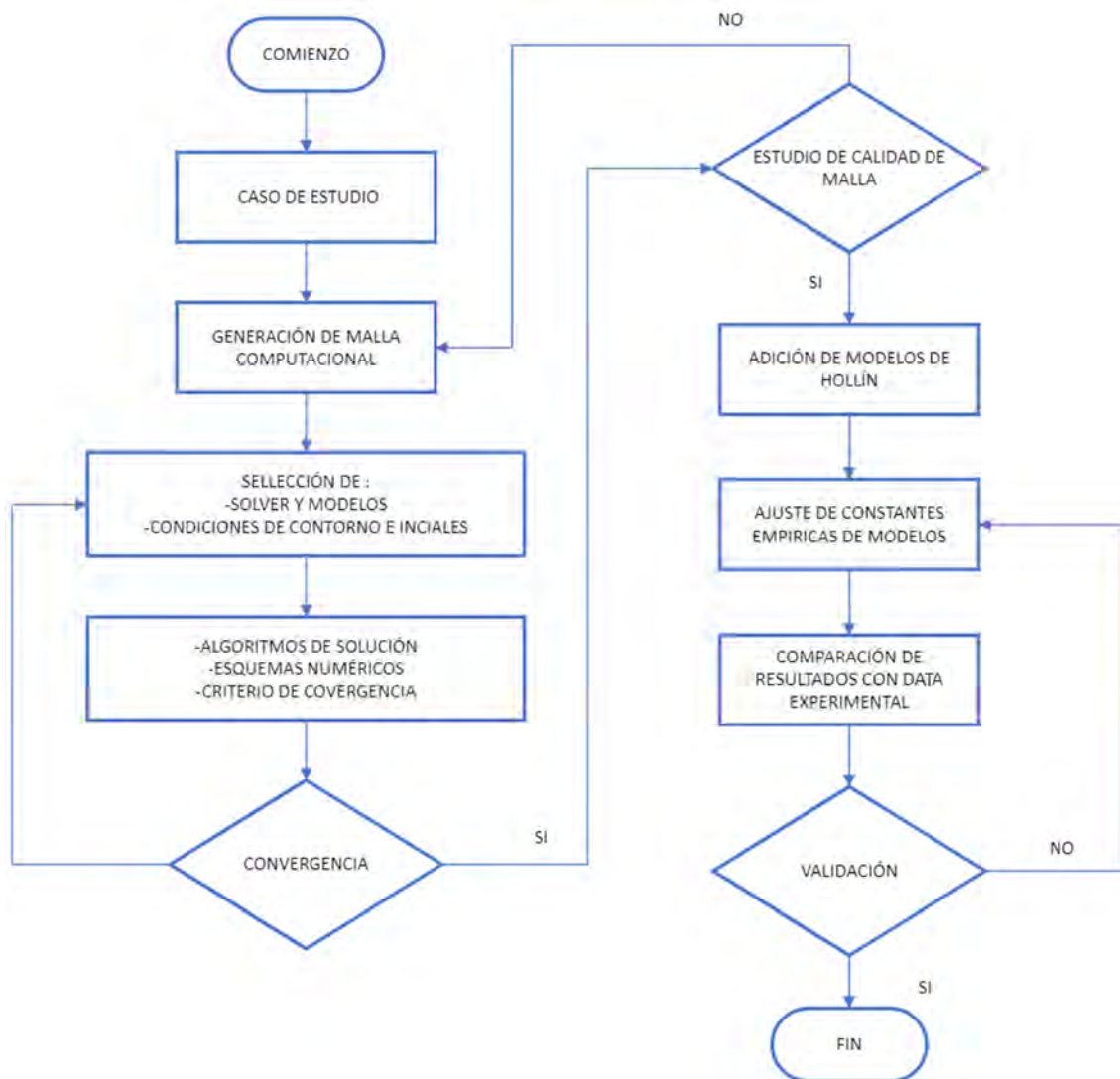
Zhang, T., Zhao, L., Kholghy, M. R., Thion, S., & Thomson, M. J. (2019). Detailed investigation of soot formation from jet fuel in a diffusion flame with comprehensive and hybrid chemical mechanisms. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(2), 2037–2045.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.012>

Zhao, H., Zheng, C., & Xu, M. (2005). Multi-Monte Carlo method for coagulation and condensation/evaporation in dispersed systems. *Journal of Colloid and Interface Science*, 286(1), 195–208. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2004.12.037>



APÉNDICES

Apéndice A Diagrama de flujo de la metodología empleada



Apéndice B twoEquation.H

```
1     const volScalarField& T = thermo.T();
2
3     const volScalarField& Y_C2H2 = mesh.lookupObject<volScalarField>("C2H2");
4
5     const volScalarField& Y_OH = mesh.lookupObject<volScalarField>("OH");
6
7     const volScalarField& Y_O2 = mesh.lookupObject<volScalarField>("O2");
```

```

8
9
10     forAll(T, celli)
11     {
12         scalar Ti = T[celli];
13
14         if (soot[celli]<1.0e-12)
15             {
16                 MSoot[celli] = 0.0;
17             }
18         else
19             {
20                 MSoot[celli] = soot[celli]*rho[celli];
21             }
22
23         if (PDSoot[celli]<1.0e-15)
24             {
25                 NSoot[celli] = 0.0;
26             }
27         else
28             {
29                 NSoot[celli] = PDSoot[celli]*rho[celli]*Nnorm;
30             }
31
32         SootVF[celli] = soot[celli]*rho[celli]/rhoS;
33         SSoot[celli] =
34         Foam::pow(6*MSoot[celli]/rhoS,2.0/3.0)*Foam::pow(constant::mathematical::pi*NSo
35         ot[celli],1.0/3.0);
36
37         r1[celli] = Ca*(Y_C2H2[celli]*rho[celli]/wC2H2)*Foam::exp(-Ta/Ti);
38
39         if (NSoot[celli]<Foam::SMALL)
40             {
41                 r2[celli] = 0.0;
42             }
43         else
44             {
45                 r2[celli] =
46         Cb*Foam::sqrt(24*8314.3*T[celli]/rhoS/NA)*Foam::pow(6*MSoot[celli]/constant::ma
47         thematical::pi/rhoS/NSoot[celli],1.0/6.0)*Foam::pow(NSoot[celli],2.0/1.0);
48             }
49
50         r3[celli] =
51         Cgg*Foam::pow(Y_C2H2[celli]*rho[celli]/wC2H2,1.0/1.0)*Foam::exp(-
52         Tg/Ti)*Foam::pow(SSoot[celli],1.0);
53
54         r4[celli] =
55         Cw1*Colleff*(Y_OH[celli]*rho[celli]/wOH)*Foam::sqrt(Ti)*SSoot[celli];
56
57         r5[celli] = Cw2*(Y_O2[celli]*rho[celli]/wO2)*Foam::exp(-
58         Tw2/Ti)*Foam::sqrt(Ti)*SSoot[celli];
59
60

```

```

61         dNSootdt[celli] = NA*r1[celli]-r2[celli];
62         dMSootdt[celli] = MWc*r1[celli]+r3[celli]-0.015*r5[celli]-
63 0.015*r4[celli];
64
65     }

```

Apéndice C momic.C

```

1  void MOMIC::Coag_regimes()
2  {
3
4      double muOneThird = std::pow(10, lagInterp3mom(1/3, std::log10(M0/M0),
5  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
6      double muMinusOneThird = std::pow(10, lagInterp3mom(-1/3,
7  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
8      double muTwoThird = std::pow(10, lagInterp3mom(2/3, std::log10(M0/M0),
9  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
10     double muMinusTwoThird = std::pow(10, lagInterp3mom(-2/3,
11  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
12     double muFourThird = std::pow(10, lagInterp3mom(4/3, std::log10(M0/M0),
13  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
14     double muOne= std::pow(10, lagInterp3mom(1, std::log10(M0/M0),
15  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
16
17     double muOneSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(1/6, std::log10(M0/M0),
18  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
19     double muMinusOneSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(-1/6,
20  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
21     double muMinusOneHalf = std::pow(10, lagInterp3mom(-1/2,
22  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
23     double muOneHalf = std::pow(10, lagInterp3mom(1/2, std::log10(M0/M0),
24  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
25
26     double muThirteenSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(13/6,
27  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
28     double muElevenSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(11/6, std::log10(M0/M0),
29  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
30     double muThreeHalf = std::pow(10, lagInterp3mom(3/2, std::log10(M0/M0),
31  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
32     double muSevenSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(7/6, std::log10(M0/M0),
33  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
34     double muFiveSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(5/6, std::log10(M0/M0),
35  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
36     double muNineteenSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(19/6,
37  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
38     double muSeventeenSixth = std::pow(10, lagInterp3mom(17/6,
39  std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
40     double muFiveHalf = std::pow(10, lagInterp3mom(5/2, std::log10(M0/M0),
41  std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
42
43

```

```

44     double f_0_0_0 = 2*(muMinusOneHalf*muOneSixth +
45 std::pow(muMinusOneSixth,2));
46     double f_1_0_0 = 2*(muMinusOneHalf*muSevenSixth +
47 2*muMinusOneSixth*muFiveSixth + muOneSixth*muOneHalf);
48     double f_2_0_0 = 2*(muMinusOneHalf*muThirteenSixth +
49 2*muMinusOneSixth*muElevenSixth + muOneSixth*muThreeHalf + \
50     2*muOneHalf*muSevenSixth + 2*std::pow(muFiveSixth,2));
51
52     double f_0_1_1 = 2*muSevenSixth*muOneHalf + 2*muFiveSixth*muFiveSixth;
53     double f_1_1_1 = 2*muThirteenSixth*muOneHalf + 4*muElevenSixth*muFiveSixth
54 + 2*muThreeHalf*muSevenSixth;
55     double f_2_1_1 = 2*muNineteenSixth*muOneHalf +
56 4*muSeventeenSixth*muFiveSixth + 2*muFiveHalf*muSevenSixth + \
57     4*muThirteenSixth*muThreeHalf + 4*muElevenSixth*muElevenSixth;
58
59     double f_oneHalf_0_0 = std::pow(10, lagInterp3mom(1/2,
60 std::log10(f_0_0_0), std::log10(f_1_0_0), std::log10(f_2_0_0)));
61     double f_oneHalf_1_1 = std::pow(10, lagInterp3mom(1/2,
62 std::log10(f_0_1_1), std::log10(f_1_1_1), std::log10(f_2_1_1)));
63
64     CoagSource_C[0] = -Kc*(1 + muOneThird*muMinusOneThird +
65 KcPrime*(muMinusOneThird +
66 muOneThird*muMinusTwoThird))*std::pow(M0,2)*normParameter;
67     CoagSource_F[0] = -0.5*Kf*std::pow(M0,2)*f_oneHalf_0_0*normParameter;
68
69     CoagSource_C[1] = 0.0;
70     CoagSource_F[1] = 0.0;
71
72     CoagSource_C[2] = Kc*(2*muOne*muOne + 2*muFourThird*muTwoThird +
73 KcPrime*(2*muTwoThird*muOneThird +
74 2*muFourThird*muOneThird))*std::pow(M0,2)*normParameter;
75
76
77     CoagSource_F[2] = Kf*std::pow(M0,2)*f_oneHalf_1_1*normParameter;
78
79 }
80
81
82 void MOMIC::CoagSource()
83 {
84     for(int i=0;i<n_moments;i++)
85     {
86         if (Kn < 0.1)
87         {
88             source_coagulation[i] = CoagSource_C[i];
89         }
90
91         else if (Kn > 8.0)
92         {
93             source_coagulation[i] = CoagSource_F[i];
94         }
95     }
96

```

```

97         else
98         {
99             if((CoagSource_C[i] + CoagSource_F[i])==0){
100
101                 source_coagulation[i]=0.0;
102             }
103             else{
104                 source_coagulation[i]=
105 CoagSource_C[i]*CoagSource_F[i]/(CoagSource_C[i] + CoagSource_F[i]);
106
107             }
108         }
109     }
110 }
111 void MOMIC::C2H2_growth()
112 {
113     double k4 = Arrhenius(A4,Ea4,n4);
114     double alpha=HACAalphaCalc();
115     double MtwoThird = M0*std::pow(10, lagInterp3mom(2/3,
116 std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
117     double MfiveThird = M0*std::pow(10, lagInterp3mom(5/3,
118 std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
119     Growth_C2H2[0] = 0.0;
120     Growth_C2H2[1] =
121 2*k4*C2H2Mc*alpha*chiSoot*M_PI*std::pow(Cs,2)*MtwoThird;
122     Growth_C2H2[2] =
123 k4*C2H2Mc*alpha*chiSoot*M_PI*std::pow(Cs,2)*(4*MtwoThird + 4*MfiveThird);
124
125 }
126
127 void MOMIC::O2_oxidation()
128 {
129     double k5 = Arrhenius(A5,Ea5,1.0);
130     double alpha=HACAalphaCalc();
131     double MtwoThird = M0*std::pow(10, lagInterp3mom(2/3,
132 std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
133     double MfiveThird = M0*std::pow(10, lagInterp3mom(5/3,
134 std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
135     Oxidation_O2[0] = 0.0;
136     Oxidation_O2[1] = -
137 2*k5*O2Mc*alpha*chiSoot*M_PI*std::pow(Cs,2)*MtwoThird;
138     Oxidation_O2[2] =
139 k5*O2Mc*alpha*chiSoot*M_PI*std::pow(Cs,2)*(4*MtwoThird - 4*MfiveThird);
140
141 }
142
143 void MOMIC::OH_oxidation()
144 {
145
146     double alpha=HACAalphaCalc();
147     double MtwoThird = M0*std::pow(10, lagInterp3mom(2/3,
148 std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
149

```

```

150         double MfiveThird = M0*std::pow(10, lagInterp3mom(5/3,
151     std::log10(M0/M0), std::log10(M1/M0), std::log10(M2/M0)));
152         Oxidation_OH[0] = 0.0;
153         Oxidation_OH[1] = -
154     2*gammaOH*OHMc*std::sqrt(M_PI*kB*T/(2*mOH))*alpha*chiSoot*M_PI*std::pow(Cs,2)*
155     MtwoThird;
156         Oxidation_OH[2] =
157     gammaOH*OHMc*std::sqrt(M_PI*kB*T/(2*mOH))*alpha*chiSoot*M_PI*std::pow(Cs,2)*(4
158     *MtwoThird - 4*MfiveThird);
    }

```

Apéndice D hmom.C

```

1 void HMOM::SootNucleationM4 ()
2 {
3
4     double nucleation_N0 = 0.;
5     if (conc_DIMER >= 1.e-20)
6     {
7         nucleation_N0 = 0.5 * betaN*std::pow(conc_DIMER, 2.) *
8     Navogad;
9     }
10
11         source_nucleation[0] = nucleation_N0;
12         source_nucleation[1] = nucleation_N0;
13         source_nucleation[2] = nucleation_N0;
14         source_nucleation[3] = nucleation_N0;
15
16     }
17
18
19 void HMOM::SootSurfaceGrowthM4 ()
20     {
21         source_growth[0] = 0.;
22         source_growth[1] =
23     ksg*surface_density*VC2*GetMoment(0., 1.)/Navogad/V0;
24         source_growth[2] =
25     ksg*surface_density*VC2*K_fractal*GetMoment(Av_fractal,As_fractal+2.)/
26     Navogad/S0;
27         source_growth[3] =-ksg*surface_density*S0*N0/Navogad;
28     }
29
30
31 void HMOM::SootOxidationM4 ()
32     {
33         double coefficient = kox * surface_density * VC2;
34

```

```

35
36         source_oxidation[0] = -coefficient*N0*S0/V0/Navogad;
37         source_oxidation[1] = -
38 coefficient/V0/Navogad*GetMissingMoment(0., 1.);
39         source_oxidation[2] = -
40 coefficient/S0/Navogad*(std::pow(S0, 2.)*N0/V0+
41 2./3.*(GetMissingMoment(-1., 2.) - S0*N0));           // M01
42         source_oxidation[3] = -coefficient * N0* S0 / V0 /
43 Navogad;
44         // NO
45     }
46
47
48 double HMOM::GetMoment( double i, double j)
49     {
50         double moment=0.0 ;
51
52         if (NL < 1.e-25 || NLVL < 1.e-25 || NLSL < 1.e-25)
53         {
54             if ((M00 != 0.) && (M10 != 0.) && (M01 != 0.))
55                 {
56                     moment = M00 * std::pow(M10 /
57 M00, i) * std::pow(M01 / M00, j);
58                 }
59
60             }
61         else
62         {
63             moment =N0*std::pow(V0, i)*std::pow(S0, j) +
64 NL*std::pow(NLVL/NL, i)*std::pow(NLSL / NL,j);
65         }
66
67
68         return moment;
69     }
70
71
72 void HMOM::SootCondensationM4()
73     {
74         double D_DIM = K_diam * std::pow(dimer_volume, 1.0 /
75 3.0);
76         double D_NUCL = K_diam * std::pow(V0, 1.0 / 3.0);
77
78         source_condensation[0] = 0.0;
79
80         source_condensation[1] = std::pow(D_DIM, 2.) *
81 (GetMoment(0., 0.) + 0.5*dimer_volume*GetMoment(-1., 0.)) +
82 std::pow(K_collisional, 2.0) * (GetMoment(2.0*Av_collisional,
83 2.0*As_collisional) + 0.5*dimer_volume*GetMoment(2.0*Av_collisional -
84 1.0, 2.0*As_collisional)) + 2.0*D_DIM*K_collisional *
85 (GetMoment(Av_collisional, As_collisional) +
86 0.5*dimer_volume*GetMoment(Av_collisional - 1.0, As_collisional));
87

```

```

88         source_condensation[1] = Cfm * std::sqrt(dimer_volume)
89 * conc_DIMER * std::sqrt(T) * source_condensation[1] / V0;
90
91         source_condensation[2] = std::pow(D_DIM, 2.) *
92 (GetMoment(Av_fractal, As_fractal + 1.0) +
93 0.5*dimer_volume*GetMoment(Av_fractal- 1., As_fractal + 1.))
94 +std::pow(K_collisional, 2.0) * (GetMoment(Av_fractal+
95 2.0*Av_collisional, As_fractal + 1. + 2.*As_collisional)+
96 0.5*dimer_volume*GetMoment(Av_fractal + 2.0*Av_collisional - 1.0,
97 As_fractal + 1. + 2.0*As_collisional)) +2.0*D_DIM*K_collisional *
98 (GetMoment(Av_fractal + Av_collisional, As_fractal + 1. +
99 As_collisional)+ 0.5*dimer_volume*GetMoment(Av_fractal+ Av_collisional
100 - 1.0, As_fractal + 1. + As_collisional));
101         source_condensation[2] = Cfm * std::sqrt(dimer_volume)
102 * conc_DIMER * std::sqrt(T) * source_condensation[2] / S0 * K_fractal;
103
104         source_condensation[3] = -Cfm * 1. /
105 std::sqrt(dimer_volume) * conc_DIMER * std::sqrt(T) * (1.0 +
106 0.5*dimer_volume / V0) * std::pow(D_DIM + D_NUCL, 2.) * N0;
107     }
108
109
110 void HMOM::SootCoagulationM4 ()
111 {
112     SootCoagulationSmallSmallM4 ();
113     SootCoagulationSmallLargeM4 ();
114     SootCoagulationLargeLargeM4 ();
115 }
116
117
118 void HMOM::SootCoagulationSmallSmallM4 ()
119 {
120     double DcNUCL = K_diam * std::pow(V0, 1. / 3.);
121     double S00 = K_spher * std::pow(2.0*V0, 2. / 3.);
122     double beta00 = 2.20*Cfm*std::sqrt(2.0 /
123 V0)*std::pow(2.*DcNUCL, 2.) * std::sqrt(T);
124
125     source_coagulation_ss[0] = -0.5* beta00 * std::pow(N0,
126 2.) / Navogad;
127     source_coagulation_ss[1] = 0.0;
128     source_coagulation_ss[2] = 0.5* beta00 * S00 / S0 *
129 std::pow(N0, 2.) / Navogad + 2.0* source_coagulation_ss[0];
130     source_coagulation_ss[3] =
131 2.0*source_coagulation_ss[0];
132 }
133
134 void HMOM::SootCoagulationSmallLargeM4 ()
135 {
136     double DcNUCL = K_diam * std::pow(V0, 1. / 3.);
137
138     {
139         double psi0 = std::pow(V0, -1. /
140 2.)* (std::pow(K_collisional, 2.) * GetMissingMoment(2.0*Av_collisional

```



```

141 - 0.5, 2.0*As_collisional) + std::pow(DcNUCL, 2.) * GetMissingMoment(-
142 1. / 2., 0.) +
143     2.0*DcNUCL*K_collisional*GetMissingMoment(Av_collisional -
144 0.5, As_collisional));
145
146     double psi1 = std::pow(V0, -1. /
147 2.)*(std::pow(K_collisional, 2.) * GetMissingMoment(2.0*Av_collisional
148 + 0.5, 2.0*As_collisional) + std::pow(DcNUCL, 2.) *
149 GetMissingMoment(1. / 2., 0.) +
150 2.0*DcNUCL*K_collisional*GetMissingMoment(Av_collisional + 0.5,
151 As_collisional));
152
153     psi1 = psi1 + V0*psi0;
154
155     source_coagulation_sl[0] = 0.0;
156     if (psi0*psi1>=0.)
157     {
158         source_coagulation_sl[0] = -2.2 * Cfm *
159 std::sqrt(T) * N0 / Navogad * std::sqrt(psi0*psi1);
160     }
161 }
162
163     source_coagulation_sl[1] = 0.0;
164
165     {
166         double psi0 = std::pow(V0, -1. /
167 2.)*(std::pow(K_collisional, 2.) * GetMissingMoment(2.0*Av_collisional
168 - 0.5 + Av_fractal, 2.0*As_collisional + As_fractal + 1.) +
169 std::pow(DcNUCL, 2.) * GetMissingMoment(-1. / 2. + Av_fractal,
170 As_fractal + 1.) +
171 2.*DcNUCL*K_collisional*GetMissingMoment(Av_collisional - 0.5 +
172 Av_fractal, As_collisional + As_fractal + 1.));
173
174         double psi1 = std::pow(V0, -1. /
175 2.)*(std::pow(K_collisional, 2.) * GetMissingMoment(2.0*Av_collisional
176 + 0.5 + Av_fractal, 2.0*As_collisional + As_fractal + 1.) +
177 std::pow(DcNUCL, 2.) * GetMissingMoment(1. / 2. + Av_fractal,
178 As_fractal + 1.) +
179 DcNUCL*K_collisional*GetMissingMoment(Av_collisional + 0.5 +
180 Av_fractal, As_collisional + As_fractal+ 1.));
181
182         psi1 = psi1 + V0*psi0;
183
184         source_coagulation_sl[2] =
185 source_coagulation_sl[0];
186         if (psi0*psi1>=0.)
187             source_coagulation_sl[2] +=
188 2.2*Cfm*std::sqrt(T)*N0*V0*K_fractal / S0 /
189 Navogad*std::sqrt(psi0*psi1);
190     }
191
192     source_coagulation_sl[3] = source_coagulation_sl[0];
193 }

```

```

194
195 void HMOM::SootCoagulationLargeLargeM4 ()
196     {
197         source_coagulation_ll[0] = 0.0;
198         source_coagulation_ll[1] = 0.0;
199         source_coagulation_ll[2] = 0.0;
200         source_coagulation_ll[3] = 0.0;
201
202         double psi0 = 2. * std::pow(K_collisional,
203 2.0)*(GetMissingMoment(2.*Av_collisional - 0.5,
204 2.*As_collisional)*GetMissingMoment(-1. / 2., 0.) +
205 GetMissingMoment(Av_collisional - 0.5, As_collisional)*
206 GetMissingMoment(Av_collisional - 0.5, As_collisional));
207         double psil = 2. * std::pow(K_collisional,
208 2.0)*(GetMissingMoment(2.*Av_collisional + 0.5,
209 2.*As_collisional)*GetMissingMoment(-1. / 2., 0.) +
210 GetMissingMoment(Av_collisional + 0.5, As_collisional)*
211 GetMissingMoment(Av_collisional - 0.5, As_collisional) +
212 GetMissingMoment(2.0*Av_collisional - 0.5,
213 2.0*As_collisional)*GetMissingMoment(1. / 2., 0.));
214
215         if (psi0*psil>=0.)
216             source_coagulation_ll[0] = -0.5 * 2.2 * Cfm *
217 std::sqrt(T) / Navogad * std::sqrt(psil*psi0);
218     }
219
220 void HMOM::SootCoagulationContinousM4 ()
221     {
222         double lambda = 8.2057e-5 / std::sqrt(2.) /
223 std::pow(200.e-12, 2.) / Navogad;
224         lambda = 1.257 * lambda * T / (p / 101325.);
225
226         SootCoagulationContinousSmallSmallM4 (lambda);
227         SootCoagulationContinousSmallLargeM4 (lambda);
228         SootCoagulationContinousLargeLargeM4 (lambda);
229     }
230
231 void HMOM::SootCoagulationContinousSmallSmallM4 ( double lambda)
232     {
233         const double DcNUCL = K_diam * std::pow(V0, 1. / 3.);
234         const double S00 = K_spher * std::pow(2.0*V0, 2. /
235 3.);
236         const double CC0 = 1. + lambda / DcNUCL;
237
238         const double beta00 = 2.0*kB*T / 3.0 / viscosity*(2 *
239 CC0 / DcNUCL)*(2.0*DcNUCL);
240
241         source_coagulation_continous_ss[0] = -0.5* beta00 *
242 std::pow(N0, 2.) / Navogad;
243         source_coagulation_continous_ss[1] = 0.;
244         source_coagulation_continous_ss[2] = 0.5* beta00 * S00
245 / S0 * std::pow(N0, 2.) / Navogad + 2.0*
246 source_coagulation_continous_ss[0];

```

```

247         source_coagulation_continous_ss[3] =
248 2.*source_coagulation_continous_ss[0];
249     }
250
251 void HMOM::SootCoagulationContinousSmallLargeM4( double lambda)
252 {
253     const double DcNUCL = K_diam * std::pow(V0, 1. / 3.);
254     const double betai0 = 2.0*kB*T / 3.0 / viscosity;
255
256     source_coagulation_continous_sl[0] = (2.0 + lambda /
257 DcNUCL)*GetMissingMoment(0., 0.) +
258         (DcNUCL + lambda) / K_collisional *
259 GetMissingMoment(-1.0*Av_collisional, -1.0*As_collisional) +
260         (1.0 + lambda / DcNUCL)*K_collisional / DcNUCL
261 * GetMissingMoment(1.0*Av_collisional, 1.0*As_collisional) +
262         lambda * DcNUCL* std::pow(K_collisional, 2.) *
263 GetMissingMoment(-2.*Av_collisional, -2.*As_collisional);
264
265     source_coagulation_continous_sl[0] = -N0 / Navogad *
266 betai0 * source_coagulation_continous_sl[0];
267
268     source_coagulation_continous_sl[1] = 0.;
269
270     source_coagulation_continous_sl[2] = (2.0 + lambda /
271 DcNUCL)*GetMissingMoment(Av_fractal, As_fractal + 1.0) +
272         (DcNUCL + lambda) / K_collisional *
273 GetMissingMoment(-1.0*Av_collisional + Av_fractal, -1.0*As_collisional
274 + As_fractal + 1.0) +
275         (1.0 + lambda / DcNUCL)*K_collisional / DcNUCL
276 * GetMissingMoment(1.0*Av_collisional + Av_fractal, 1.0*As_collisional
277 + As_fractal + 1.0) +
278         lambda * DcNUCL* std::pow(K_collisional, 2.) *
279 GetMissingMoment(-2.0*Av_collisional + Av_fractal, -2.0*As_collisional
280 + As_fractal + 1.0);
281
282     source_coagulation_continous_sl[2] = N0*V0*K_fractal /
283 S0 / Navogad * betai0* source_coagulation_continous_sl[2] +
284 source_coagulation_continous_sl[0];
285
286     source_coagulation_continous_sl[3] =
287 source_coagulation_continous_sl[0];
288 }
289
290 void HMOM::SootCoagulationContinousLargeLargeM4( double lambda)
291 {
292     const double DcNUCL = K_diam * std::pow(V0, 1. / 3.);
293     const double betai0 = 2.0*kB*T / 3.0 / viscosity;
294
295     source_coagulation_continous_ll[0] =
296 GetMissingMoment(0., 0.) * GetMissingMoment(0., 0.) +
297         lambda / K_collisional * (GetMissingMoment(0.,
298 0.) * GetMissingMoment(-1.*Av_collisional, -1.*As_collisional) +
299

```

```

300                                     GetMissingMoment(Av_collisional,
301 As_collisional) * GetMissingMoment(-2.*Av_collisional, -
302 2.*As_collisional) +
303                                     GetMissingMoment(Av_collisional,
304 As_collisional) * GetMissingMoment(-1.*Av_collisional, -
305 1.*As_collisional));
306
307                                     source_coagulation_continuous_ll[0] = -0.5 * betai0 /
308 Navogad * source_coagulation_continuous_ll[0];
309
310                                     source_coagulation_continuous_ll[1] = 0.0;
311                                     source_coagulation_continuous_ll[2] = 0.0;
312                                     source_coagulation_continuous_ll[3] = 0.0;
    }

```

Apéndice E dsm.C

```

1  void DSM::NucSource()
2  {
3      double pah_volume = (CMW/rhoSoot/Na)*NC_PAH;
4
5      double BetaNuc = 4.0*std::sqrt(2.0)*kfm*std::pow(pah_volume,1.0/6.0)
6
7  ;
8
9
10     Q_nuc[0] =
11     2.0*pah_volume*BetaNuc*std::pow(molar_concentration(Y_PAH,MW_PAH)*Na,2.0);
12     for (int i = 1; i < n_bins; i++)
13     {
14         Q_nuc[i] = 0.0;
15     }
16 }
17
18 void DSM::CondSource()
19 {
20     double pah_volume = (CMW/rhoSoot/Na)*NC_PAH;
21     for (int i = 0; i < n_bins; i++)
22     {
23         double BetaCond = beta_fm(v[i],pah_volume) ;
24
25
26

```

```

27         Q_cond[i] =
28 pah_volume*BetaCond*molar_concentration(Y_PAH,MW_PAH)*Na*Q[i]/(V[i+1]-
29 V[i])*std::log(V[i+1]/V[i]);
30     }
31 }
32 }
33
34
35 double DSM::beta_fm(double v_i,double v_j)
36 {
37
38     double
39 beta_fm=kfm*std::pow(std::pow(v_i,1.0/3.0)+std::pow(v_j,1.0/3.0),2.0)*std::sq
40 rt(1.0/v_i+1.0/v_j);
41
42     return beta_fm;
43 }
44 }
45
46 double DSM::beta_1(int r,int p, int i)
47 {
48
49     double beta_1;
50     if (V[i] < v[r]+v[p] && v[r]+v[p] <= V[i+1])
51     {
52         beta_1=beta_fm(v[r],v[p])/((V[r+1]-V[r])*(V[p+1]-
53 V[p]))*(std::log(V[r+1]/V[r])*(V[p+1]-V[p])+std::log(V[p+1]/V[p])*(V[r+1]-
54 V[r]));
55     }
56     else {
57         beta_1=0.0;
58     }
59
60     return beta_1;
61 }
62
63
64 double DSM::beta_2(int r,int i)
65 {
66
67     double beta_2;
68     if (v[r]+v[i] > V[i+1])
69     {
70         beta_2=beta_fm(v[r],v[i])/((V[r+1]-V[r])*(V[i+1]-
71 V[i]))*(std::log(V[r+1]/V[r])*(V[i+1]-V[i]));
72     }
73     else {
74         beta_2=-beta_fm(v[r],v[i])/((V[r+1]-V[r])*(V[i+1]-
75 V[i]))*(std::log(V[i+1]/V[i])*(V[r+1]-V[r]));
76     }
77
78     return beta_2;
79 }

```

```

80
81 double DSM::beta_3(int i)
82     {
83
84         double beta_3;
85         if (v[i]+v[i] > V[i+1])
86             {
87                 beta_3=beta_fm(v[i],v[i])/((V[i+1]-V[i])*(V[i+1]-
88 V[i]))*2*(std::log(V[i+1]/V[i])*(V[i+1]-V[i]));
89             }
90         else {
91             beta_3=0.0;
92         }
93
94         return beta_3;
95     }
96
97 double DSM::beta_4(int r,int i)
98     {
99
100    double beta_4;
101
102    beta_4=beta_fm(v[r],v[i])/((V[r+1]-V[r])*(V[i+1]-
103 V[i]))*(std::log(V[r+1]/V[r])*(V[i+1]-V[i]));
104
105    return beta_4;
106    }
107
108
109 void DSM::CoagSource()
110 {
111
112    for(int i = 0; i < n_bins; i++)
113    {
114        if ( i < 1 )
115        {
116            Q_coag_1[i]= 0.0;
117            Q_coag_2[i]= 0.0;
118            Q_coag_3[i]= -1.0/2.0 *beta_3(i)*Q[i]*Q[i];
119            double sum4=0.0;
120            for (int r=i+1; r < n_bins; r++)
121                {
122                    sum4= sum4 + beta_4(r,i)*Q[r] ;
123                }
124            Q_coag_4[i]=-Q[i]*sum4 ;
125        }
126        else
127        {
128            double sum2 = 0.0;
129            for (int r=0; r < i; r++)
130                {
131                    double sum1=0.0;
132                    for (int p=0; r < i; r++)

```

```

133         {
134             sum1 = sum1 +
135 beta_1(r,p,i)*Q[r]*Q[p] ;
136         }
137         sum2= sum2 + sum1;
138     }
139
140     Q_coag_1[i]= sum2;
141
142
143     double sum3= 0.0;
144     for (int r=0; r < i; r++)
145     {
146         sum3= sum3 + beta_2(r,i)*Q[r];
147     }
148
149     Q_coag_2[i]= -sum3*Q[i];
150
151     Q_coag_3[i]= -1.0/2.0 *beta_3(i)*Q[i]*Q[i];
152     double sum4=0.0;
153     for (int r=i+1; r < n_bins; r++)
154     {
155         sum4= sum4 + beta_4(r,i)*Q[r] ;
156     }
157     Q_coag_4[i]=-Q[i]*sum4 ;
158
159 }
160
161
162
163
164     Q_coag[i] = (Q_coag_1[i] + Q_coag_2[i] + Q_coag_3[i] +
165 Q_coag_4[i])/1.0;
166
167
168     }
169 }
170
171
172
173
174
175 void DSM::GrowthSource()
176 {
177     double k4 = Arrhenius(A4,Ea4,n4);
178     double VC=(CMW/rhoSoot/Na);
179     for (int i = 0; i < n_bins; i++)
180     {
181         double Csoot = alpha(i)*chiSoot*Si(i)/Na;
182
183
184         Q_sg[i] = 2.0*VC*k4*C2H2Mc*Csoot*Na;
185     }

```

```

186
187
188
189 }
190
191
192 void DSM::OxidationSource()
193 {
194     double k5 = Arrhenius(A5,Ea5,1.0);
195     double VC=(CMW/rhoSoot/Na);
196
197     for (int i = 0; i < n_bins; i++)
198     {
199         double Csoot = alpha(i)*chiSoot*Si(i)/Na;
200
201
202         Q_ox[i] = -2.0*VC*k5*O2Mc*Csoot*Na*0.2-
203 1.0*VC*0.13*OHMc*Na*beta_fm(v[i],VC)*Q[i]/(V[i+1]-
204 V[i])*std::log(V[i+1]/V[i]);
205     }
206
207
208 }
209
210 void DSM::intersectional()
211 {
212     for (int i = 0; i < n_bins; i++)
213     {
214         if ( i < 1 )
215         {
216             Q_COND[i]=ins_sg_c(i, Q_cond[i]) ;
217             Q_SG[i]=ins_sg_c(i, Q_sg[i]) ;
218             Q_OX[i]=out_ox(i+1, Q_ox[i+1]) + Q_ox[i]/10.0 ;
219         }
220         else if ( 1<= i && i < n_bins -1)
221         {
222
223             Q_COND[i]=out_sg_c(i-1, Q_cond[i-1]) + ins_sg_c(i,
224 Q_cond[i]) ;
225
226             Q_SG[i]=out_sg_c(i-1, Q_sg[i-1]) + ins_sg_c(i,
227 Q_sg[i]) ;
228             Q_OX[i]=out_ox(i+1, Q_cond[i+1]) + ins_ox(i,
229 Q_cond[i]) ;
230
231         }
232
233         else if ( i==n_bins-1)
234         {
235             Q_COND[i]=out_sg_c(i-1, Q_cond[i-1]) + Q_cond[i] ;
236             Q_SG[i]=out_sg_c(i-1, Q_sg[i-1]) + Q_sg[i] ;
237             Q_OX[i]=Q_ox[i];
238

```



```

239         }
240
241     }
242
    }

```

Apéndice F blockMeshDict

```

1 /*-----*- C++ -*-----*\
2 | ===== |
3 | \\ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4 | \\ / Operation | Version: 2.1.x |
5 | \\ / And | Web: www.OpenFOAM.org |
6 | \\ / Manipulation |
7 /*-----*\
8 FoamFile
9 {
10     version 2.0;
11     format ascii;
12     class dictionary;
13     location "constant/polyMesh";
14     object blockMeshDict;
15 }
16 // ***** //
17
18 convertToMeters 0.001;
19
20 vertices
21 (
22     (0.000000000000e+00 0.000000000000e+00 0.000000000000e+00) // 0
23     (2.2 0.0960540744 0.000000000000e+00) // 1
24     (2.2 0.0960540744 8.000000000e+02) // 2
25
26     (0.000000000000e+00 0.000000000000e+00 8.000000000e+02) // 3
27     (2.2 -0.0960540744 0.000000000000e+00) // 4
28     (2.2 -0.0960540744 8.000000000e+02) // 5
29
30     (0.000000000000e+00 0.000000000000e+00 -7.000000000000e+01) // 6
31     (2.2 0.0960540744 -7.000000000000e+01) // 7
32     (2.2 -0.0960540744 -7.000000000000e+01) // 8
33
34     (3.2 0.1397150173 0.000000000000e+00) // 9
35     (3.2 -0.1397150173 0.000000000000e+00) // 10
36     (3.2 0.1397150173 8.000000000e+02) // 11
37     (3.2 -0.1397150173 8.000000000e+02) // 12
38
39     (75 3.2745707181 0.000000000000e+00) // 13
40     (75 -3.2745707181 0.000000000000e+00) // 14
41     (75 3.2745707181 8.000000000e+02) // 15
42     (75 -3.2745707181 8.000000000e+02) // 16
43

```

```

44 (3.2 0.1397150173 -7.000000000000e+01) // 17
45 (75 3.2745707181 -7.000000000000e+01) // 18
46 (75 -3.2745707181 -7.000000000000e+01) // 19
47 (3.2 -0.1397150173 -7.000000000000e+01) // 20
48
49 (3.2 -0.1397150173 -1.500000000000e+00) // 21
50 (3.2 0.1397150173 -1.500000000000e+00) // 22
51 (75 -3.2745707181 -1.500000000000e+00) // 23
52 (75 3.2745707181 -1.500000000000e+00) // 24
53
54 (2.93550953 0.12816711399 0.000000000000e+00) // 25
55 (2.93550953 -0.12816711399 0.000000000000e+00) // 26
56 (2.93550953 0.12816711399 8.0000000e+02) // 27
57 (2.93550953 -0.12816711399 8.000000000e+02) // 28
58
59 );
60
61 blocks
62 (
63     hex (0 4 1 0 3 5 2 3) (10 1 250) simpleGrading
64 (0.500000000000e+00 1.000000000000e+00 80.000000000000e+00)
65     hex (6 8 7 6 0 4 1 0) (10 1 50) simpleGrading
66 (0.500000000000e+00 1.000000000000e+00 0.03)
67     hex (4 26 25 1 5 28 27 2) (5 1 250) simpleGrading
68 (1.000000000000e+00 1.000000000000e+00 80.000000000000e+00)
69     hex (26 14 13 25 28 16 15 27) (50 1 250) simpleGrading
70 (30.000000000000e+00 1.000000000000e+00 80.000000000000e+00)
71     hex (20 19 18 17 21 23 24 22) (50 1 50) simpleGrading
72 (30.000000000000e+00 1.000000000000e+00 0.03)
73     hex (21 23 24 22 26 14 13 25) (50 1 8) simpleGrading
74 (30.000000000000e+00 1.000000000000e+00 1.000000000000e+00)
75 );
76
77 edges
78 (
79 );
80
81 boundary
82 (
83     inletfuel
84     {
85         type patch;
86         faces
87         (
88             (6 7 8 6)
89         );
90     }
91
92     inletair
93     {
94         type patch;
95         faces
96         (

```

```

97     (19 20 17 18)
98     );
99   }
100
101   outlet
102   {
103     type patch;
104     faces
105     (
106     (2 3 3 5)
107     (28 27 2 5)
108     (16 15 27 28)
109     );
110   }
111
112
113   sidewall
114   {
115     type patch;
116     faces
117     (
118     (14 13 15 16)
119     (19 18 24 23)
120     (23 24 13 14)
121     );
122   }
123
124   burnerwall
125   {
126     type wall;
127     faces
128     (
129     (8 7 1 4)
130     (21 22 17 20)
131     (26 21 22 25)
132     (4 1 25 26)
133     );
134   }
135
136   front
137   {
138     type wedge;
139     faces
140     (
141     (1 0 3 2)
142     (7 6 0 1)
143     (25 1 2 27)
144     (13 27 25 15)
145     (18 17 22 24)
146     (24 22 25 13)
147
148     );
149   }

```

```

150
151     back
152     {
153         type wedge;
154         faces
155         (
156             (5 3 0 4)
157             (4 0 6 8)
158             (26 4 5 28)
159             (14 28 26 16)
160             (19 20 21 23)
161             (23 21 26 14)
162         );
163     }
164
165 );
166
167 mergePatchPairs
168 (
169 );

```

Apéndice G Ejemplo de archivo de condiciones iniciales y de contorno

```

1 /*-----*- C++ -*-----*\
2 | ===== |
3 | \\      /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4 | \\      /  O p e r a t i o n | Version: v2006 |
5 | \\      /  A n d      | Website: www.openfoam.com |
6 |  \\/      M a n i p u l a t i o n |
7 /*-----*\
8 FoamFile
9 {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         volScalarField;
13     location      "0.79";
14     object        soot;
15 }
16 // * * * * *
17
18 dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];
19
20
21 internalField   uniform 0;
22
23 boundaryField
24 {
25     COFLOW

```

```
26 {
27     type          zeroGradient;
28 }
29 FUEL
30 {
31     type          zeroGradient;
32 }
33 bluffBody
34 {
35     type          zeroGradient;
36 }
37 nuevo
38 {
39     type          zeroGradient;
40 }
41 WALL
42 {
43     type          zeroGradient;
44 }
45 OUTLET
46 {
47     type          zeroGradient;
48 }
49 }
50 }
51
52
53 //
```

