

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



**EVALUACIÓN NUMÉRICA DE MODELOS DE COMBUSTIÓN
TURBULENTA USANDO HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES DE CÓDIGO
ABIERTO EN UN QUEMADOR TIPO *BLUFF-BODY***

Tesis para obtener el título profesional de Ingeniero Mecánico

AUTOR:

Edward Javier Manrique De la Cruz

ASESOR:

Dr. César Celis Pérez

CO-ASESOR:

Prof. Luis Fernando Figueira da Silva

Lima, marzo del 2024

Informe de Similitud

Yo, César Celis Pérez
docente de la Facultad de Ciencias e Ingeniería de la Pontificia
Universidad Católica del Perú, asesor de la tesis titulada
..... "Evaluación numérica de modelos de combustión turbulenta usando herramientas
computacionales de código abierto en un quemador tipo bluff-body"
del autor..... Edward Javier Manrique De la Cruz
.....
.....

dejo constancia de lo siguiente:

- El mencionado documento tiene un índice de puntuación de similitud de 21%. Así lo consigna el reporte de similitud emitido por el software *Turnitin* el 19/09/2023.
- He revisado con detalle dicho reporte y la Tesis o Trabajo de Suficiencia Profesional, y no se advierte indicios de plagio.
- Las citas a otros autores y sus respectivas referencias cumplen con las pautas académicas.

Lugar y fecha: ... San Miguel, 16 de marzo de 2024

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

Resumen

La combustión representa una de las principales fuentes de generación de energía en el mundo en la actualidad y lo seguirá siendo en los próximos años debido al creciente consumo energético mundial. A pesar de todas sus ventajas, la combustión trae consigo el problema de la contaminación ambiental, debido a los gases y partículas nocivas producidas durante las reacciones químicas. Por ello estudios continuos son requeridos para hacerla cada vez más eficiente y menos dañina para el medio ambiente y la salud humana. El presente trabajo tiene como objetivo principal estudiar llamas turbulentas difusivas en un quemador tipo *bluff-body* usando herramientas computacionales de dinámica de fluidos computacional (CFD) de código abierto. El modelamiento numérico es realizado utilizando abordajes del tipo *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS) y *Large Eddy Simulation* (LES). La interacción entre las reacciones químicas y la turbulencia es descrita con los modelos de combustión *Eddy Dissipation Concept* (EDC) y *Flamelet Progress Variable* (FPV), en conjunto con el mecanismo de cinética química GRI-MECH 3.0. Modelos particulares de turbulencia considerados incluyen el modelo RANS k-omega y LES WALE. Finalmente, los resultados son comparados y validados con datos experimentales disponibles en la literatura de campos de velocidad, tensores de Reynolds y perfiles de OH. El principal aporte de este trabajo es la evaluación a detalle de los modelos de combustión EDC-RANS y FPV-LES para posteriormente determinar si pueden ser considerados en un marco numérico, actualmente en desarrollo, capaz de modelar la formación de hollín en sistemas de combustión presentando fuertes interacciones entre turbulencia, reacción química y formación de hollín.



*Dedicada a Javier Alberto Manrique Ramirez y Vilma Celinda
De la Cruz Paucar, mis padres, que han sido mi mayor
motivación en mi etapa universitaria.*

Agradecimientos

Agradecer a Dios por brindarme salud y la oportunidad de vivir una etapa en la universidad.

A mi padres, Javier y Vilma, por todo el esfuerzo y el apoyo incondicional que fueron mi motivación para dar lo mejor de mí en cada ciclo universitario. A mis hermanos, Renzo y Erika, por acompañarme en esta etapa y hacer mis días más alegres.

Al Dr. César Celis, una excelente persona, quien aceptó ser mi asesor y me dió la bienvenida al grupo de investigación FPCE-PUCP. Agradecer su confianza y sus enseñanzas a lo largo del desarrollo de este trabajo. Extender esta gratitud al Prof. Luis Fernando Figueira da Silva por compartir sus valiosos conocimientos en CFD. También agradecer a todos los miembros del grupo FPCE-PUCP, con quienes mantengo una fuerte amistad, por el apoyo brindado.

A todos los amigos y profesores que conocí y me acompañaron a lo largo de mi recorrido universitario y de quienes aprendí mucho influyendo en el ingeniero mecánico que soy ahora.

Este trabajo fue financiado por CONCYTEC-FONDECYT (PROCIENCIA), contrato No. 415-2019-2019-FONDECYT, “Identificación de precursores de hollín en procesos de combustión turbulenta por medio de modelamiento numérico para reducir el impacto del hollín en la salud y el medio ambiente”.

Contenido

Índice de figuras.....	vi
Nomenclatura.....	viii
Introducción	1
Capítulo 1. Formulación matemática.....	9
1.1. Ecuaciones gobernantes.....	9
1.2. Modelos de turbulencia	11
1.2.1. Modelo k-omega en RANS.....	12
1.2.2. Modelo Wall-Adapting Local Eddy-viscosity en LES.....	14
1.3. Modelos de combustión.....	17
1.3.1. Modelo Eddy Dissipation Concept en RANS.....	17
1.3.2. Modelo Flamelet Progress Variable en LES.....	19
Capítulo 2. Modelamiento numérico	26
2.1. Solver y esquemas numéricos	26
2.2. Configuración geométrica y malla computacional.....	27
2.3. Condiciones iniciales y de contorno.....	29
2.4. Mecanismo de cinética química	30
Capítulo 3. Resultados y discusiones.....	31
3.1. Análisis del flujo en el caso RANS-EDC.....	31
3.1.1. Campos medios de velocidad	31
3.1.2. Tensores de Reynolds y energía cinética turbulenta.....	34
3.1.3. Distribución y perfiles OH.....	40

3.2. Análisis del flujo en el caso LES-FPV	43
3.2.1. Generación y calidad de <i>flamelets</i>	43
3.2.2. Campos medios de velocidad	44
3.2.3. Tensores de Reynolds y energía cinética turbulenta.....	47
3.2.4. Distribución y perfiles OH.....	49
Conclusiones	52
Bibliografía	54
Apéndices.....	59



Índice de figuras

Figura 1. Proyección del consumo energético mundial para el 2040 por fuente de energía [33].	1
Figura 2. Una solución promediada de un flujo turbulento [5].....	12
Figura 3. Lugar geométrico de las temperaturas máximas de un conjunto completo de soluciones de las ecuaciones de <i>flamelet</i> (curva en forma de S) [25].....	22
Figura 4. a) Esquema del quemador tipo <i>bluff-body</i> con dimensiones en mm usado en los experimentos realizados por Caetano y Figueira da Silva [2]. b) Dominio computacional con dimensiones en mm.....	28
Figura 5. Sección transversal de la malla computacional 3D.	29
Figura 6. Contornos (i) experimentales y (ii) numéricos de las componentes axial U_y (superior) y radial U_x (inferior) de la velocidad media.....	32
Figura 7. Perfiles de (a) velocidad axial media U_y , (b) energía cinética turbulenta k , (c) tensor de Reynolds normal radial R_{xx} y (d) tensor de Reynolds normal axial R_{yy} a lo largo del eje axial.....	33
Figura 8. Perfiles radiales de las componentes (—) axial U_y y (- -) radial U_x de la velocidad media en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$	34
Figura 9. Contornos (i) experimentales y (ii) numéricos de las componentes radial R_{xx} (superior) y axial R_{yy} (inferior) del tensor de Reynolds normal.	36
Figura 10. Perfiles radiales de las componentes (—) radial R_{xx} y (- -) axial R_{yy} del tensor de Reynolds normal en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$	37
Figura 11. Contornos i) experimentales y ii) numéricos de la energía cinética turbulenta k (superior) y el tensor de Reynolds cruzado R_{xy} (inferior).	39
Figura 12. Perfiles radiales de (—) la energía cinética turbulenta k y (- -) el tensor de Reynolds cruzado R_{xy} en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$	40

Figura 13. Contornos i) experimental y ii) numérico de OH.....	41
Figura 14. Perfiles radiales de OH en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$	42
Figura 15. Soluciones de flamelet. Temperatura como una función de a) χ_{st} en la fracción de mezcla estequiométrica $Z_{st} = 0.055$, y b) fracción de mezcla con estados de (—) reacción estable, (- -) reacción inestable y (-.-) extinción completa.	44
Figura 16. Contornos de las componentes a) axial (U_y) y b) radial (U_x) de la velocidad media (m/s).....	46
Figura 17. Comparación de la velocidad axial media calculada U_y , las componentes normales del tensor de tensión de Reynolds R_{yy} , R_{xx} y la energía cinética turbulenta k (líneas sólidas) con los datos experimentales (símbolos \square) a lo largo del eje axial.....	46
Figura 18. Comparación de la velocidad media calculada axial U_y (líneas sólidas) y radial U_x (líneas discontinuas) con los resultados experimentales (axial y radial, símbolos Δ y \square , respectivamente) en diferentes posiciones axiales fijas.....	46
Figura 19. Contornos de a) R_{yy} , b) R_{xx} , c) R_{xy} y d) $k \text{ (m}^2/\text{s}^2)$	48
Figura 20. Comparación de a) R_{yy} y b) R_{xy} calculados (líneas sólidas) con el experimento (símbolos Δ), y a) R_{xx} y b) k (líneas discontinuas) con el experimento (símbolos \square) en diferentes posiciones axiales.....	49
Figura 21. Comparación cualitativa de los campos instantáneos del radical OH. a) Datos experimentales de PLIF-OH, b) fracciones de masa calculadas.....	50
Figura 22. a) Comparación de los contornos de OH normalizados y las líneas de corriente. b) Comparación entre los valores predichos de OH normalizados (líneas sólidas) y los datos experimentales de PLIF-OH (símbolos \square) en diferentes posiciones axiales.	51

Nomenclatura

Variables

Δ	Ancho de banda de filtro
$C_{p,s}$	Capacidad calorífica de la especie química s
C_p	Capacidad calorífica de la mezcla
D_s	Coefficiente de difusión molecular de la especie química s
D_z	Coefficiente de difusión molecular de la fracción de mezcla
k_c	Conductividad térmica de la mezcla
C_g	Constante en la ecuación de transporte de Z''^2
C_d	Constante de la ecuación de transporte de Z''^2
C_w	Constante del modelo WALE
C_k	Constante del modelo WALE
C_y	Constante de y_L
C_τ	Constante de τ^*
R_u	Constante universal de los gases
δ_{ij}	Delta de Kronecker
ρ	Densidad del fluido
D	Difusividad de masa
D_t	Difusividad turbulenta
k	Energía cinética turbulenta
h_F	Entalpía de combustión
h_0	Entalpía de formación
h_s	Entalpía de la especie química s
h	Entalpía de la mezcla
τ^*	Escala de tiempo para la transferencia de masa entre la estructura fina y el fluido circundante
s	Especie química
G	Filtro espacial de paso bajo
ω	Frecuencia turbulenta
Z_{st}	Fracción estequiométrica de la mezcla
y_L	Fracción de longitud de la celda ocupada por la estructura fina

Y_s^*	Fracción de masa de las especies en la estructura fina
Y_F	Fracción de masa de las especies del combustible
Y_s	Fracción de masa de la especie química s
Z	Fracción de mezcla
Le	Número de Lewis
σ_h	Número de Prandtl de la mezcla
σ_h^{SGS}	Número de Prandtl turbulento sub-malla
σ_h^t	Número de Prandtl turbulento de la mezcla
Sc_s^t	Número de Schmidt turbulento de la especie química s
Sc_s^{SGS}	Número de Schmidt turbulento sub-malla de la especie química s
Sc_s	Número de Schmidt de la especie química s
$(MW)_s$	Peso molecular de la especie química s
x_i	Posición en la dirección i
p	Presión mecánica
a_s	Tasa de deformación en el punto de estancamiento de la llama
χ_{st}	Tasa de disipación escalar estequiométrica
χ_q	Tasa de disipación escalar en el punto crítico o límite de extinción
χ	Tasa de disipación escalar instantánea
P_k	Tasa de producción de la energía cinética turbulenta
T	Temperatura
τ_{ij}	Tensor de esfuerzos viscosos
S_{ij}	Tensor de tasa de deformación
S_{ij}^d	Tensor simétrico
S_{rad}	Término fuente de radiación
S_{comb}	Término fuente de combustión
F	Término fuente de la ecuación de cantidad de movimiento
ω_s	Término fuente en el transporte de la especie química s
ω_c	Término fuente de la variable de progreso
t	Tiempo
Z_{eta}	Varianza de la fracción de mezcla normalizada
Z''^2	Varianza de la fracción de mezcla
C	Variable de progreso

u_i	Velocidad en la dirección i
μ	Viscosidad dinámica del fluido
ν	Viscosidad cinemática del fluido
μ_{SGS}	Viscosidad turbulenta sub-malla
μ_t	Viscosidad turbulenta del fluido



Abreviaturas

CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DNS	Direct Numerical Simulation
DFSEM	Divergence-Free Synthetic Eddy
EBU	Eddy Break-Up
EDC	Eddy Dissipation Concept
FVM	Finite Volume Method
FPV	Flamelet Progress Variable
IEO	International Energy Outlook
LES	Large Eddy Simulation
MINEM	Ministerio de Energía y Minas
PSR	Perfectly Stirred Reactor
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operator
PDF	Probability Density Function
PAH	Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
SLFM	Steady Laminar Flamelet
WALE	Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity

Introducción

Procesos de combustión son responsables por más del 80% de energía consumida en el mundo. En particular, los combustibles fósiles como el gas natural y el petróleo representan más del 70 % de la matriz energética primaria mundial en la actualidad. Como indicado en la Figura 1, además, un crecimiento del 28% en el consumo energético mundial entre 2015 y 2040 ha sido proyectado en el *International Energy Outlook 2017* (IEO2017) [33]. Esta publicación también indica que combustibles como el gas natural y el petróleo continuarán representando más de tres cuartas partes del consumo energético mundial para el año 2040. Esto es a pesar de que es proyectado que combustibles no fósiles, como aquellos involucrando energías renovables y energía nuclear, tendrán un crecimiento mayor al de los combustibles fósiles.

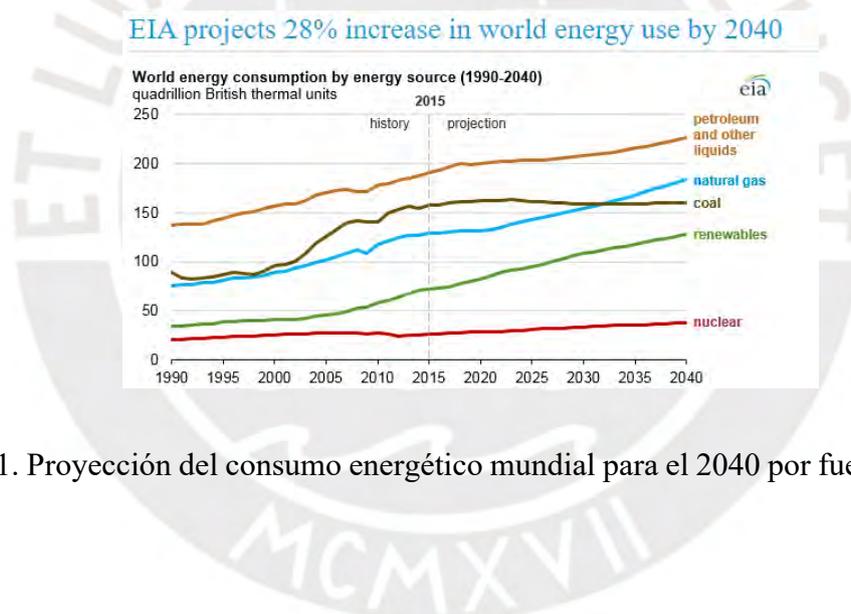


Figura 1. Proyección del consumo energético mundial para el 2040 por fuente de energía [33].

En el Perú, el Ministerio de Energía y Minas (MINEM) publicó en noviembre del año 2014 el documento “Plan Energético Nacional 2014-2025” [16]. De acuerdo a este documento, el crecimiento del consumo energético estará relacionado al desarrollo económico y social del país en los próximos años. Asimismo, el gas natural será el recurso más utilizado tanto a nivel de consumo final como en los sectores de transformación y petroquímica para el año 2025.

A pesar de su importancia en la generación de energía, la combustión genera efectos negativos en el medio ambiente y en la salud humana. Esto ocurre debido a que esta involucra reacciones químicas en las cuales gases nocivos como el dióxido de carbono (CO_2) y los óxidos de nitrógeno (NO_x), y material particulado como el hollín, son generados. Las emisiones gaseosas dañinas envenenan el entorno mismo en el que vivimos, pues causan enfermedades respiratorias y cardiovasculares en el ser humano [1]. El material particulado como el hollín representa partículas sólidas provenientes de la combustión incompleta de combustibles de hidrocarburos y responsable de efectos notoriamente perjudiciales para la salud humana, la calidad del aire y el clima regional y global [15]. Por lo tanto, el estudio de la combustión y la formación de contaminantes, incluyendo CO_2 , NO_x y hollín, es importante para mejorar la eficiencia de los procesos asociados y reducir el nivel de contaminación generado.

Estudios experimentales de llamas, involucrando mediciones de temperatura y fracción de masa de algunas especies químicas importantes como el radical hidroxilo (OH), son comúnmente realizados usando técnicas avanzadas de diagnóstico por láser proporcionando datos valiosos [34] [2]. Sin embargo, la aplicabilidad de las técnicas de medición modernas tiene límites tanto económicos como prácticos, debido a que los bancos de ensayos deben diseñarse y construirse, lo cual es un procedimiento costoso, demorado y requiere operadores altamente calificados. Por otro lado, el uso de dinámica de fluidos computacional (CFD) permite el estudio de la combustión y la formación de especies químicas sin la necesidad de implementar equipos de laboratorio costosos. Además, las computadoras actuales han logrado grandes avances en el rendimiento permitiendo realizar simulaciones numéricas cada vez más complejas [10]. Sin embargo, los modelos numéricos desarrollados tienen que ser validados con data experimental, con lo cual las mediciones experimentales en constante mejora proporcionan datos valiosos y son parte inherente al desarrollo del modelo.

A pesar del extraordinario progreso en CFD en las últimas dos décadas, describir con precisión los procesos de combustión turbulenta sigue siendo un desafío, debido a que es un fenómeno físico complejo el cual involucra fuertes gradientes de temperatura y densidad, y turbulencia [23]. La combustión turbulenta es el resultado de interacciones bidireccionales entre turbulencia y combustión y estas interacciones afectan las propiedades de la llama, como su tasa de propagación y área superficial [28]. Por lo tanto, una adecuada comprensión de la combustión turbulenta es requerida para capturar con precisión estas interacciones.

El modelo de combustión Eddy Break-Up (EBU) basado en RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*) ha sido usado para predecir llamas no-premezcladas turbulentas con resultados razonablemente precisos [35]. Este modelo es popular debido a su bajo costo computacional especialmente en aplicaciones industriales involucrando simulaciones RANS [32]. Sin embargo, la precisión de este modelo es limitada debido a que asume que la reacción química es infinitamente rápida y que la velocidad de reacción está controlada por la mezcla turbulenta [35]. Por otro lado, el modelo de combustión *Eddy Dissipation Concept* (EDC) es una versión extendida del modelo EBU desarrollado por Magnussen [28] que puede incorporar cálculos químicos detallados en combustión turbulenta, el cual tiene un gran impacto en el resultado de las simulaciones obtenidas y el costo computacional. EDC ha sido aplicado con éxito en simulaciones numéricas de combustión turbulenta [6] [19], y está implementado en la mayoría de los códigos de CFD comerciales.

El modelo de combustión *Steady Laminar Flamelet* (SLFM), propuesto por Peters (1983, 1984) considera una llama no premezclada turbulenta como un conjunto de *flamelets* laminares [22] [23]. SLFM reproduce relativamente bien los datos experimentales de referencia en términos de temperatura y fracción de mezcla [11] [18] [3]. Sin embargo, este modelo es inexacto para las predicciones de procesos químicos o físicos lentos, como la formación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH), los cuales son especies precursoras en la

formación de hollín [27] [9]. El modelo *Flamelet Progress Variable* (FPV) constituye una variante del enfoque *flamelet* en discusión. FPV fue propuesto por Pierce y Moin (2001, 2004) como un modelo para la combustión no premezclada turbulenta en contextos LES (*large eddy simulation*) [25]. FPV ofrece potencialmente una mejor descripción de los fenómenos de extinción y reignición local de llamas y despegue (*lift-off*) de estas [7] [8]. En general, los modelos de combustión basados en *flamelets* han sido utilizados ampliamente en el pasado para modelar llamas no premezcladas turbulentas debido a sus notables ventajas en términos de reducción del costo computacional.

En consecuencia, el presente trabajo está centralizado en evaluar numéricamente la capacidad de los modelos de combustión EDC-RANS y FPV-LES para predecir llamas difusivas estabilizadas usando un quemador *bluff-body*, en cual es usado con frecuencia en la industria [2]. Debido al fuerte acoplamiento entre la reacción química, la turbulencia y la formación de hollín, el modelo de combustión tiene un impacto significativo en las predicciones del nivel de hollín formado [34]. Por lo tanto, este trabajo representa un esfuerzo adicional para alcanzar el objetivo de largo plazo que involucra el desarrollo de un marco numérico capaz de describir adecuadamente la formación de hollín en procesos de combustión turbulenta presentes en sistemas de combustión prácticos.

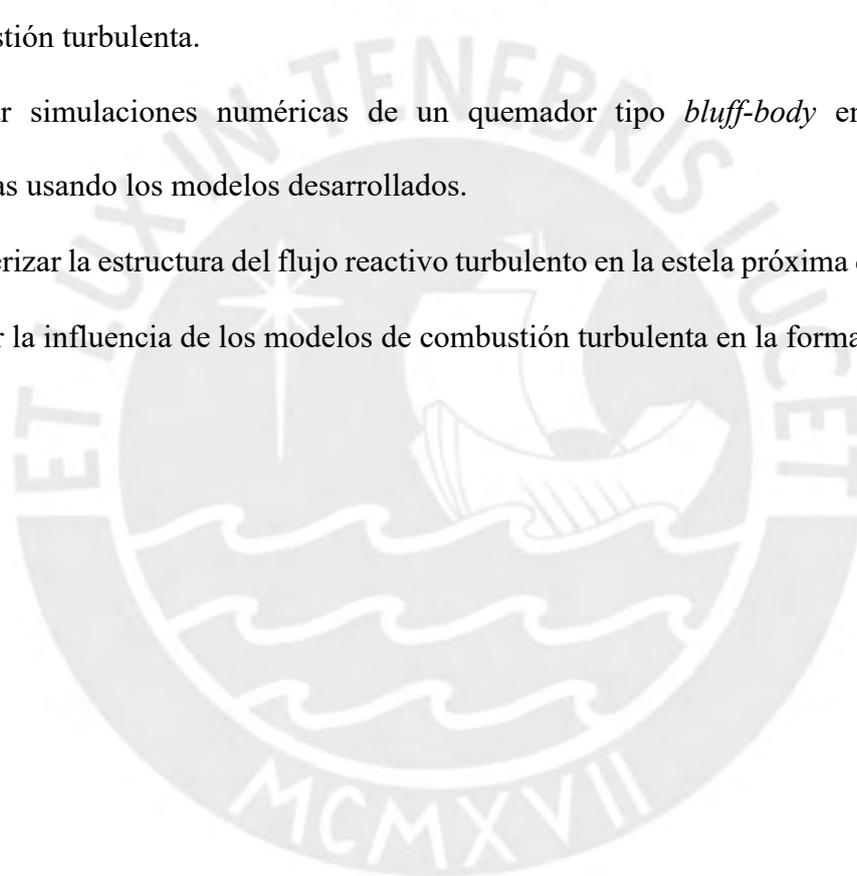
Objetivos

Objetivo general

Evaluar numéricamente modelos de combustión turbulenta en la estela próxima de un quemador tipo *bluff-body* utilizando herramientas computacionales de código abierto.

Objetivo Específicos

- Desarrollar modelos numéricos que permitan simular adecuadamente procesos de combustión turbulenta.
- Realizar simulaciones numéricas de un quemador tipo *bluff-body* en condiciones reactivas usando los modelos desarrollados.
- Caracterizar la estructura del flujo reactivo turbulento en la estela próxima del quemador.
- Evaluar la influencia de los modelos de combustión turbulenta en la formación de OH.



Metodología

La metodología seguida para alcanzar los objetivos propuestos en este trabajo incluyó las etapas indicadas a continuación.

- **Revisión bibliográfica**

La revisión bibliográfica inicial es realizada para entender los fundamentos físicos de flujos turbulentos reactivos y el uso de las herramientas computacionales (CFD) para describir numéricamente dichos flujos. Posteriormente, información específica sobre los modelos de combustión en libros y revistas científicas es revisada de manera continua. De forma paralela, modelos de combustión disponibles en el software de código abierto OpenFOAM [21] a ser utilizado son también estudiados.

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

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

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

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

- **Análisis y conclusión de resultados**

Luego de la caracterización de las simulaciones numéricas, los distintos casos son analizados tomando como referencia los resultados experimentales disponibles. Resultados cercanos a los experimentales en campos de velocidad, tensores de Reynolds y OH son buscados a través de las simulaciones. A partir de este análisis las conclusiones sobre el trabajo son obtenidas.

Alcance

La evaluación numérica de las capacidades de los modelos de combustión EDC y FPV para caracterizar llamas turbulentas no premezcladas en quemadores tipo *bluff-body* es desarrollada en este trabajo. Es de particular interés determinar si los modelos evaluados pueden capturar las características fundamentales del flujo reactivo que caracterizan a los quemadores estudiados. Todas las simulaciones numéricas son realizadas en la herramienta computacional de código abierto OpenFOAM, versión v2006 [21]. El Caso 5 de las mediciones experimentales realizadas por Caetano y Figueira da Silva en 2015 [2] es usado como data experimental. Únicamente, las componentes de la velocidad, la energía cinética turbulenta (k), los tensores de Reynolds y la especie química OH son analizados y comparados en términos cualitativos y cuantitativos.

Descripción de la tesis

El trabajo realizado es descrito en 3 capítulos principales. En el Capítulo 1, las ecuaciones gobernantes de los flujos turbulentos reactivos considerados en este trabajo, así como también los modelos de turbulencia y combustión requeridos en el modelamiento numérico de estos, son descritos. En el Capítulo 2, el modelamiento numérico de un caso de una llama difusiva turbulenta en OpenFOAM es tratado. El solver y esquemas numéricos, la configuración geométrica, la generación de la malla computacional, las condiciones de contorno usadas y la

generación de *flamelets* son discutidos. Finalmente, en el Capítulo 3, todos los resultados numéricos obtenidos son analizados y comparados en términos cualitativos y cuantitativos con las mediciones experimentales realizadas por Caetano y Figueira da Silva [2]. Los principales parámetros analizados son las componentes de la velocidad, la energía cinética turbulenta (k), los tensores de Reynolds y la especie química OH.



Capítulo 1. Formulación matemática

Las ecuaciones gobernantes de los flujos turbulentos reactivos considerados en este trabajo, así como también los modelos de turbulencia y combustión requeridos en el modelamiento numérico de estos, son descritos en este capítulo.

1.1. Ecuaciones gobernantes

Flujos turbulentos a bajo número de Mach (< 0.3) y con densidad variable son considerados en este trabajo. Las ecuaciones de transporte que gobiernan de estos flujos, masa, cantidad de movimiento y energía, son expresadas como [35],

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

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

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{1}{Sc_s} - \frac{1}{\sigma_h} \right) \sum_{s=1}^N h_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial t} + S_{rad} + S_{comb}. \quad (3)$$

En estas ecuaciones, u_i representa la velocidad, x_i la posición, ρ es la densidad, p es la presión y μ es la viscosidad dinámica. Además, Sc_s es el número de Schmidt de cada especie química, σ_h es el número de Prandtl de la mezcla, h es la entalpía de la mezcla, S_{rad} es el término fuente de radiación y S_{comb} es el término fuente de combustión. Similarmente, F es el término fuente de la ecuación de cantidad de movimiento (el cual puede incluir la gravedad).

Adicionalmente, el tensor de esfuerzos viscosos τ_{ij} es definido como,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (4)$$

donde δ_{ij} es el delta de Kronecker.

El número de Schmidt es calculado a partir de una expresión de la forma,

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

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

Y el número de Prandtl de la mezcla es determinado a partir de,

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

donde k_c es la conductividad térmica de la mezcla.

También, la entalpía de la mezcla y la entalpía de cada especie son determinados de expresiones como,

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

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

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

Otras relaciones importantes consideradas en este trabajo incluyen la fracción de masa total del combustible, oxidante y especies inertes, cuya sumatoria es igual a 1,

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

La temperatura es determinada a partir de la entalpía usando una expresión de la forma,

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

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

El valor promedio de la capacidad calorífica de la mezcla $\overline{C_p}$ es calculado de,

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

donde C_p es definido como,

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

La densidad local de la mezcla es dependiente de la presión, la concentración de reactantes y productos y la temperatura de la mezcla. Este parámetro es calculado usando la ecuación de estado,

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

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

Adicionalmente, en flujos reactivos, la ecuación de transporte (conservación de masa) de las especies s es expresada como,

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i Y_s)}{\partial x_i} = \frac{\partial \left(\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i} \right)}{\partial x_i} + \dot{\omega}_s, \quad (14)$$

donde $\dot{\omega}_s$ es el término fuente de cada ecuación de transporte de cada especie química y hace referencia a la velocidad volumétrica de generación o destrucción de las especies debido a las reacciones químicas.

1.2. Modelos de turbulencia

Las ecuaciones gobernantes indicadas en la Sección 1.1 raramente son resueltas directamente. Esto es debido a que el costo computacional para resolver todas las escalas de

tiempo y longitud presentes en flujos turbulentos con números de Reynolds elevados es prohibitivo. Por lo tanto, modelos son usualmente requeridos para resolver estas ecuaciones. Dos abordajes comúnmente empleados incluyen RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*) y LES (*large eddy simulation*).

1.2.1. Modelo k-omega en RANS

La idea en RANS es tratar a las ecuaciones gobernantes en un sentido de promedio de Reynolds y obtener soluciones para los campos medios. Al hacer esto, solo las propiedades de flujo más importantes son capturadas. Según este abordaje, primero, una solución media es obtenida promediando sus valores instantáneos correspondientes [Ec. (15)] y luego el valor instantáneo es descompuesto en una parte media y una fluctuante [Ec. (16)] [35],

$$\bar{u}_i = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N u_i|_a, \quad (15)$$

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i. \quad (16)$$

Luego, para obtener las ecuaciones RANS, el valor medio \bar{u}_i y la fluctuación u'_i son sustituidos en las ecuaciones gobernantes. Como ilustración, la Figura 2 muestra las componentes promedio y fluctuante de una variable cualquiera.

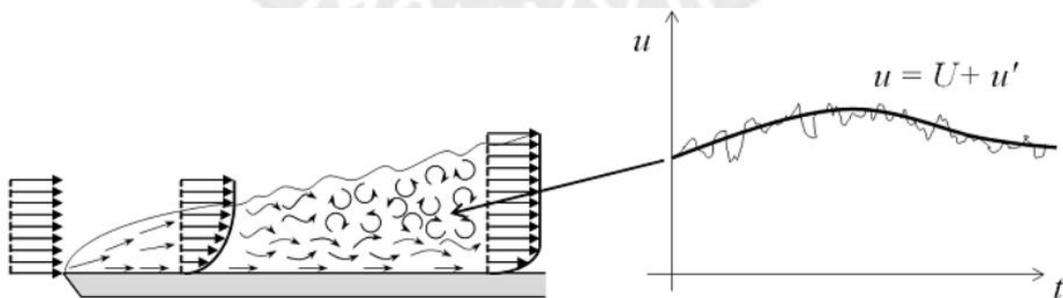


Figura 2. Una solución promediada de un flujo turbulento [5].

La formulación RANS para flujos con densidad variable es usada en este trabajo. Así, el método de promedio de Favre es utilizado para simplificar las ecuaciones de transporte y tomar en cuenta el cambio de la densidad durante la derivación de las ecuaciones medias. En consecuencia, las ecuaciones RANS de masa, cantidad de movimiento, energía y especies químicas son expresadas como [35],

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u''_i u''_j})}{\partial x_i}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h})}{\partial x_j} = \frac{\partial \left[\left(\frac{\mu}{\sigma_h} + \frac{\mu_t}{\sigma_h^t} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right]}{\partial x_j} + \bar{S}_H \quad (19)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_s}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_s)}{\partial x_j} = \frac{\partial \left[\left(\frac{\mu}{Sc_s} + \frac{\mu_t}{Sc_s^t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j} \right]}{\partial x_j} + \bar{\omega}_s, \quad (20)$$

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

En las ecuaciones RANS todavía existe un problema de cierre debido a la presencia del tensor de Reynolds, el cual incluye el producto de fluctuaciones de velocidad, las cuales son desconocidas en este tipo de abordaje. La tarea de los modelos de turbulencia RANS es proporcionar aproximaciones para este tensor. En el presente trabajo, el modelo de turbulencia k-omega, desarrollado por Wilcox [36], es utilizado. Este modelo ha sido seleccionado debido a que, comparado a otros modelos de 2 ecuaciones, este es superior en el tratamiento de la región viscosa cercana a la pared, lo cual permite describir razonablemente bien la capa límite en los ductos de ingreso del combustible y aire a la zona de combustión [35] [14]. El modelo k-omega utilizado es de 2 ecuaciones y usa la energía cinética turbulenta k como primera variable y la frecuencia turbulenta ω como segunda variable.

El tensor de Reynolds es modelado usando la hipótesis de (viscosidad de) Boussinesq como indicado a seguir,

$$\overline{\rho u''_i u''_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \delta_{ij} \quad (21)$$

donde la viscosidad turbulenta es definida como $\mu_t = \bar{\rho} \tilde{k} / \tilde{\omega}$.

Las ecuaciones de transporte para \tilde{k} y $\tilde{\omega}$ para flujos turbulentos de alto número de Reynolds son expresadas como [36],

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{k})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta^* \bar{\rho} \tilde{k} \tilde{\omega}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\omega})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\omega})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_j} \right] + \frac{\gamma_1 \tilde{\omega}}{\tilde{k}} P_k - \beta_1 \bar{\rho} \tilde{\omega}^2, \quad (23)$$

donde la tasa de producción de la energía cinética turbulenta P_k es calculada como,

$$P_k = -\overline{\rho u''_i u''_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (24)$$

y $\sigma_k = 2$, $\sigma_\omega = 2$, $\gamma_1 = 0.553$, $\beta_1 = 0.075$ y $\beta^* = 0.09$ son constantes del modelo [35].

1.2.2. Modelo Wall-Adapting Local Eddy-viscosity en LES

En abordajes tipo LES, las mayores escalas de la turbulencia, que son afectadas por la geometría del flujo y no son universales, son resueltas directamente, mientras que los efectos de las escalas menores, que tienen, hasta cierto punto, un carácter universal, son modelados [30]. En flujos turbulentos, la energía y la anisotropía están contenidas predominantemente en las escalas mayores, las cuales controlan la dinámica de la turbulencia y son responsables de la mayor parte de la transferencia de cantidad de movimiento y la mezcla en el flujo. En LES, estas escalas mayores son resueltas explícitamente permitiendo que los resultados obtenidos

sean más precisos y confiables que aquellos obtenidos usando modelos RANS [27]. Por otro lado, LES es una técnica más costosa computacionalmente que RANS, pero menos que DNS (*direct numerical simulation*), pues evita el gran costo computacional que representa resolver las escalas menores [30]. En LES, para separar las escalas mayores y menores, un filtro espacial de paso bajo es usualmente aplicado a cualquier variable del flujo $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$ sobre el dominio computacional Ω ,

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; \Delta(\mathbf{x})) \phi(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}', \quad (25)$$

donde $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; \Delta(\mathbf{x}))$ es la función de filtro y Δ es el ancho de banda de filtro, el cual es implícitamente definido por el tamaño de la malla,

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta_x \times \Delta_y \times \Delta_z} \quad (26)$$

donde Δ_i es la distancia en la dirección i que tendría la mínima escala resuelta.

La formulación LES para flujos con densidad variable es usada en este trabajo. Así, el método de variables filtradas de Favre es utilizado para simplificar las ecuaciones de transporte y tomar en cuenta el cambio de la densidad durante la operación de filtrado [35]. En consecuencia, las ecuaciones filtradas de masa, cantidad de movimiento, energía y especies químicas son expresadas como [28],

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (27)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial [\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)]}{\partial x_j}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (28)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h})}{\partial x_j} = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial \left[\left(\frac{\mu}{\sigma_h} + \frac{\mu_{SGS}}{\sigma_h^{SGS}} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right]}{\partial x_j} + \bar{S}_H, \quad (29)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_s)}{\partial x_j} = \frac{\partial\left[\left(\frac{\mu}{Sc_s} + \frac{\mu_{SGS}}{Sc_s^{SGS}}\right)\frac{\partial\tilde{Y}_s}{\partial x_j}\right]}{\partial x_j} + \bar{\omega}_s, \quad s = 1, \dots, N_s \quad (30)$$

donde $\bar{\rho}(\tilde{u}_i\tilde{u}_j - \tilde{u}_i\tilde{u}_j)$ es el tensor de Reynolds sub-malla, μ_{SGS} es la viscosidad turbulenta sub-malla, σ_h^{SGS} es el número de Prandtl turbulento sub-malla y Sc_s^{SGS} es el número de Schmidt turbulento sub-malla para cada especie.

De manera similar al tensor de Reynolds en RANS, el tensor de Reynolds sub-malla en LES es modelado usando la hipótesis de (viscosidad de) Boussinesq a través de,

$$\bar{\rho}(\tilde{u}_i\tilde{u}_j - \tilde{u}_i\tilde{u}_j) = -\mu_{SGS}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k}\right) + \frac{2}{3}\bar{\rho}k_{SGS}\delta_{ij} \quad (31)$$

donde la viscosidad turbulenta sub-malla μ_{SGS} y la energía cinética turbulenta sub-malla k_{SGS} necesitan ser modelados. En el presente trabajo, el modelo de turbulencia sub-malla WALE (*wall-adapting local eddy-viscosity*) es usado para tratar los problemas de cierre en las ecuaciones gobernantes [20]. WALE es un modelo algebraico de viscosidad turbulenta que supera algunas deficiencias conocidas del modelo estándar de Smagorinsky [17].

En el modelo WALE, la viscosidad turbulenta sub-malla μ_{SGS} para las escalas no resueltas es definida como,

$$\mu_{SGS} = \bar{\rho}(C_w\Delta)^2 \frac{(\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (32)$$

donde $C_w=0.325$ es una constante del modelo, y el tensor de tasa de deformación \tilde{S}_{ij} y el tensor simétrico \tilde{S}_{ij}^d son calculados como,

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right), \quad (33)$$

$$\widetilde{S}_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (34)$$

Asimismo, la energía cinética turbulenta sub-malla k_{SGS} es calculada a través de,

$$\mu_{SGS} = \bar{\rho} C_k \Delta \sqrt{k_{SGS}}, \quad (35)$$

donde $C_k=0.094$ es una constante del modelo.

1.3. Modelos de combustión

El modelamiento de flujos reactivos implica la resolución de las ecuaciones de transporte para todas las especies químicas, usando un mecanismo de cinética química adecuado, y la determinación del término fuente de reacción química. Sin embargo, resolver un gran número de ecuaciones de transporte podría, hasta cierto punto, ser manejable en abordajes RANS, pero es muy costoso en LES. Además, el término fuente de reacción química medio o filtrado es difícil de determinar debido a que es una función no lineal de los escalares siendo transportados. Por lo tanto, para obtener resultados relativamente precisos de manera computacionalmente eficiente, modelos son usualmente requeridos para el tratamiento de la combustión. En este trabajo, los modelos de combustión RANS EDC (*eddy dissipation concept*) y LES FPV (*flamelet progress variable*) son utilizados.

1.3.1. Modelo Eddy Dissipation Concept en RANS

EDC (*eddy dissipation concept*) es un modelo de reacción química con tasa finita, el cual puede incorporar los efectos de la cinética química detallada en flujos reactivos turbulentos [13]. EDC asume que la reacción química ocurre en las regiones donde la disipación de la energía turbulenta es considerablemente alta. En flujos turbulentos, estas regiones son denominadas estructuras finas y ocupan solo una pequeña fracción del flujo donde ocurre la disipación de la turbulencia en calor, así como de la mezcla entre los reactivos a escala molecular [12]. Asimismo, las escalas de longitud de estas regiones son del orden de las escalas

de Kolmogorov. En el modelo EDC, el fluido es dividido en dos subzonas: (i) la fracción de volumen de la estructura fina, donde la reacción ocurre, y (ii) la fracción de volumen del fluido circundante, el cual es considerado inerte. Asumiendo que todas las estructuras finas son reactores perfectamente agitados (PSR), la transferencia de masa de la especie entre la estructura fina y el fluido circundante es igual a la tasa media de consumo/producción de la especie $\overline{\dot{\omega}_s}$ [13]. Esta tasa media, la cual representa el término fuente de las ecuaciones de conservación de masa de las especies, es calculada como [6],

$$\overline{\dot{\omega}_s} = -\frac{\bar{\rho}y_L^2}{(1-y_L^2)} \frac{(\tilde{Y}_s - \tilde{Y}_s^*)}{\tau^*}, \quad (36)$$

donde $\bar{\rho}$ es la densidad, y_L es la fracción de longitud de la celda ocupada por la estructura fina, τ^* es la escala de tiempo para la transferencia de masa entre la estructura fina y el fluido circundante, \tilde{Y}_s es la fracción de masa promedio de las especies, y \tilde{Y}_s^* es la fracción de masa de las especies en la estructura fina.

Aquí, y_L y τ^* son calculados utilizando expresiones de la forma [6],

$$y_L = C_y \left(\frac{\nu \tilde{\epsilon}}{\tilde{k}^2} \right)^{1/4}. \quad (37)$$

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\tilde{\epsilon}} \right)^{1/2}, \quad (38)$$

donde \tilde{k} es la energía cinética turbulenta, $\tilde{\epsilon}$ es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, ν es la viscosidad cinemática, y C_y y C_τ son las constantes del modelo igual a 2.1377 y 0.4803, respectivamente [6]. En el presente trabajo, debido a que el modelo de turbulencia k-omega es usado, $\tilde{\epsilon}$ es calculada a través de la relación $\tilde{\omega} = \tilde{\epsilon}/\tilde{k}$.

A su vez, \tilde{Y}_s es resuelta directamente a través de la ecuación de conservación de masa de las especies. Considerando una reacción química con tasa finita, \tilde{Y}_s^* es calculada así tratando la

estructura fina como un reactor perfectamente agitado (PSR) con tiempo de residencia τ^* , y con presión y entalpía constantes [6].

1.3.2. Modelo Flamelet Progress Variable en LES

1.3.2.1. Generación de flamelet

FPV (*flamelet progress variable*) ha sido introducido como un modelo para estudios de combustión turbulenta no-premezclada en LES [24] [25]. FPV está basado en el enfoque *flamelet*, el cual considera una llama difusiva turbulenta como un conjunto de *flamelets*, los cuales son elementos de llama laminar estable, finita y localmente unidimensional incrustados en el flujo turbulento y que interactúan con él [23]. La principal ventaja de este enfoque es que este desacopla la estructura química compleja de la llama de la dinámica del flujo, el cual puede modelarse de forma independiente [4]. Este desacoplamiento es obtenido a través de la introducción de una variable independiente de la química (escalar pasivo) llamada fracción de mezcla Z . De esta forma, la estructura de la llama es descrita por las fracciones de masa de las especies químicas y la temperatura que están relacionadas de forma única con Z , que luego es usada para describir la dinámica del flujo reactivo. Z cuantifica el grado de mezcla de oxidante y combustible, y es normalizada para que varíe de 0 en el lado del oxidante a 1 en el lado del combustible.

En consecuencia, las fracciones de masa de especies químicas y la temperatura son obtenidas a través de la solución de las ecuaciones de *flamelet* [4],

$$-\rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} = \dot{\omega}, \quad (39)$$

donde ρ es la densidad, ϕ es el vector de fracciones de masa de las especies químicas y la temperatura, y $\dot{\omega}$ denota sus respectivos términos fuente. La influencia de la dinámica del flujo sobre la estructura del *flamelet* es representada por la tasa de disipación escalar instantánea de

la fracción de mezcla χ en la Ec. (39). El valor de χ es definido como proporcional al gradiente de la fracción de mezcla, el cual está relacionada con la deformación del *flamelet*,

$$\chi = 2D_z |\nabla Z|^2, \quad (40)$$

donde D_z es el coeficiente de difusión molecular de la fracción de mezcla. La tasa de disipación escalar local es la variable que controla la mezcla y puede ser interpretado como la inversa del tiempo de difusión característico (dimensión 1/s). Para resolver la Ec. (39), la dependencia funcional de la tasa de disipación escalar con respecto a la fracción de mezcla [Ec. (40)] es modelada a través de una expresión analítica basada en un modelo de llama laminar difusiva a contracorriente [23],

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2\}, \quad (41)$$

donde a_s es la tasa de deformación en el punto de estancamiento de la llama y erfc^{-1} es la inversa de la función de error complementaria. La expresión que es usada para relacionar a_s con la tasa de disipación escalar estequiométrica $\chi_{st} = \chi(Z_{st})$ es [23],

$$a_s = \frac{\chi_{st}\pi}{\exp\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st})]^2\}}. \quad (42)$$

Así, la dependencia funcional de la tasa de disipación escalar con la fracción de mezcla $\chi(Z)$ es parametrizada por χ_{st} , que actúa como un parámetro externo que modela el efecto del campo de la fracción de mezcla sobre la estructura del *flamelet* [23],

$$\chi = \chi_{st} \frac{\exp\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2\}}{\exp\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st})]^2\}}. \quad (43)$$

Utilizando esta última expresión en las ecuaciones de *flamelet* [Ec. (39)], la solución de estas es obtenida con dos parámetros de entrada: Z y χ_{st} . Un conjunto de valores discretos de χ_{st} es

utilizado desde el equilibrio ($\chi_{st} = 0$) hasta un valor asociado con la extinción de la llama ($\chi_{st} = \chi_q$).

La solución de las ecuaciones de *flamelet* es usualmente representada mediante la llamada curva en forma de S [Figura 3], cuyas ramas superior e inferior describen las soluciones de reacción estable y extinción completa, respectivamente, y la rama intermedia son las soluciones de reacción inestable [25]. El punto de temperatura máxima en la Figura 3 corresponde a la solución en estado de equilibrio químico donde la tasa de disipación escalar es igual a cero $\chi_{st} = 0$. A medida que la tasa de disipación escalar aumenta, la temperatura máxima de las soluciones de reacción estable (rama superior) disminuye debido al incremento en la mezcla de los reactantes que disminuye las concentraciones de los productos. Cuando el punto crítico o límite de extinción $\chi_{st} = \chi_q$ es alcanzado, un pequeño incremento en la tasa de disipación escalar a partir de ahí dará como resultado una solución de extinción completa. Sin embargo, existe una transición distinta de un estado de reacción estable a un estado de extinción completa identificado por las soluciones de reacción inestable (rama intermedia). Así, el punto de inflexión entre las ramas superior e intermedia corresponde a $\chi_{st} = \chi_q$. A lo largo de la rama intermedia, la tasa de disipación escalar disminuye al disminuir la temperatura máxima de la solución para mantener la mezcla en equilibrio con las tasas de reacción más bajas. Finalmente, en las soluciones de extinción completa (rama inferior), los estados químicos son una mezcla inerte de los reactivos e independientes de la tasa de disipación escalar.

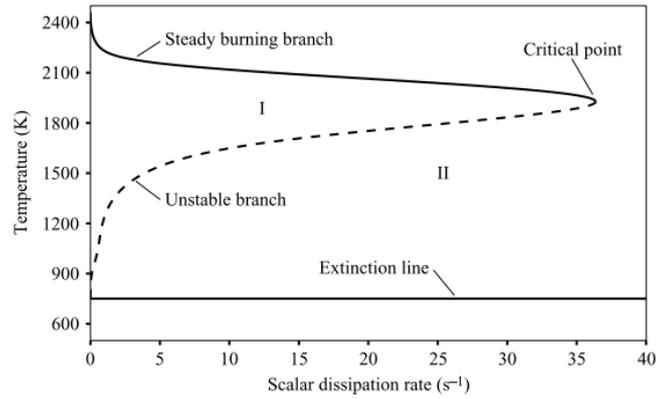


Figura 3. Lugar geométrico de las temperaturas máximas de un conjunto completo de soluciones de las ecuaciones de *flamelet* (curva en forma de S) [25].

Debido a que existen múltiples soluciones para determinados valores de la tasa de disipación escalar, una parametrización única de las soluciones de *flamelet* en términos de la tasa de disipación escalar no representa todo el espacio de soluciones. Usualmente, en las aplicaciones del modelo *flamelet*, sólo las soluciones de reacción estable (rama superior) y extinción completa para $\chi_{st} > \chi_q$ son consideradas y las soluciones de reacción inestable (rama intermedia) son ignorados. Sin embargo, la ausencia de estas soluciones hace que el modelo *flamelet* sea incapaz de tratar fenómenos locales de extinción y reignición [24]. Para tratar este problema, el modelo de combustión FPV utiliza como parámetro *flamelet* la variable de progreso C , que es un escalar reactivo que identifica de forma única cada estado de la llama a lo largo de la curva en forma de S, incluyendo la rama inestable.

1.3.2.2. Formulación del modelo FPV

En el presente trabajo, la variable de progreso C es definida como una combinación lineal de especies químicas presentes en los productos de combustión, $C = Y_{H_2O} + Y_{CO_2} + Y_{H_2} + Y_{CO}$. De manera similar, el término fuente de la variable de progreso, denotado por $\overline{\omega}_C$, es definida como una combinación lineal del término fuente de reacción química de las fracciones de masa de especies químicas presentes en los productos de combustión, $\overline{\omega}_C = \dot{\omega}_{H_2O} + \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{H_2} +$

$\dot{\omega}_{CO}$ [7]. Así, todos los escalares termoquímicos obtenidos a partir de la solución de la Ec. (39) son parametrizadas en términos de la fracción de mezcla y la variable de progreso, $\phi = \phi(Z, C)$.

Así, las soluciones de *flamelet* obtenidas son preprocesadas para obtener las tablas *look-up* integradas para los escalares termoquímicos filtrados $\tilde{\phi}$,

$$\tilde{\phi} = \tilde{\phi}(\tilde{Z}, \tilde{Z}_{eta}, \tilde{C}), \quad (44)$$

donde \tilde{Z} es la fracción de mezcla filtrada, \tilde{Z}_{eta} es su varianza normalizada y \tilde{C} es la variable de progreso filtrada. El rango de la varianza de la fracción de mezcla \tilde{Z}''^2 está relacionado con el valor medio de \tilde{Z} , debido a que \tilde{Z}''^2 tiene valores entre 0 y un máximo de $\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})$ en el campo de flujo turbulento. Por lo tanto, un rango particular fijo de \tilde{Z}''^2 no puede ser usado como parámetro de las tablas *look-up*. En su lugar, la varianza normalizada de la fracción de mezcla \tilde{Z}_{eta} , definida como,

$$\tilde{Z}_{eta} = \frac{\tilde{Z}''^2}{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}, \quad (45)$$

es usada como parámetro de control, junto con \tilde{Z} y \tilde{C} . Para cada parámetro, el rango de valores de cada parámetro, el número de puntos discretos para cubrir el rango y la distribución de los puntos discretos son definidos. Luego, los valores filtrados de los escalares termoquímicos $\tilde{\phi}$ son calculados como [25],

$$\tilde{\phi} = \int_{C_{min}}^{C_{max}} \int_0^1 \phi(Z, C) \tilde{P}(Z, C) dZ dC, \quad (46)$$

Donde $\tilde{P}(Z, C)$ es la función de densidad de probabilidad (PDF) conjunta de Z y C . Debido a que cada solución de *flamelet* es identificado con un valor dado de C , que es independiente de

la fracción de mezcla Z , las variables Z y C son considerados estadísticamente independientes.

Esto simplifica el modelamiento de la PDF conjunta de Z y C que es tratada como,

$$\tilde{P}(Z, C) = \tilde{P}(Z)\tilde{P}(C), \quad (47)$$

donde $\tilde{P}(Z)$ y $\tilde{P}(C)$ son las PDF marginales de Z y C , respectivamente. La PDF marginal de la fracción de mezcla Z es descrita mediante la forma de una función beta (β -PDF),

$$\tilde{P}(Z) = \tilde{Z}^{\alpha-1}(1 - \tilde{Z})^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}, \quad (48)$$

donde Γ es la función gamma, y α y β son los parámetros de la β -PDF que determinan su forma y dependen de la fracción de la mezcla filtrada \tilde{Z} y su varianza \tilde{Z}''^2 ,

$$\alpha = \tilde{Z} \left(\frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \right), \quad (49)$$

$$\beta = (1 - \tilde{Z}) \left(\frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \right). \quad (50)$$

Por otro lado, la PDF marginal de la variable de progreso C es descrita mediante una función delta de Dirac (δ -PDF) [25] [7].

El modelo de combustión FPV requiere la solución de las siguientes ecuaciones de transporte para la fracción de mezcla filtrada \tilde{Z} , la varianza de la fracción de mezcla SGS \tilde{Z}''^2 y la variable de progreso filtrada \tilde{C} [25],

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right], \quad (51)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \right] + C_g \bar{\rho} D_t \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \bar{\rho} D_t \frac{\tilde{Z}''^2}{\Delta^2}, \quad (52)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{C}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_C, \quad (53)$$

donde D es la difusividad de masa, D_t es la difusividad turbulenta, C_g y C_d son constantes del modelo y Δ es el ancho del filtro. En este trabajo, números de Lewis igual a uno ($Le = 1$) son considerados para todas las especies. Así, la difusividad de masa es considerada igual a la difusividad térmica y D_t es tratada de acuerdo con la relación $Sc_t = \mu_t / (\bar{\rho} D_t) = 0.7$, donde Sc_t es el número de Schmidt turbulento y μ_t es la viscosidad dinámica turbulenta, calculada a través del modelo de turbulencia sub-malla. Δ es calculado a su vez como la raíz cúbica del volumen de la celda. De hecho C_g no es una constante libre en el modelo, debido a que un valor teórico de 2 es encontrado en la derivación de la ecuación de transporte exacta [7], y este valor es usado aquí. C_d es una constante del modelo e igual a 2 [23]. Finalmente, durante las simulaciones numéricas, todas las cantidades termoquímicas filtradas, incluidas $\bar{\rho}$ y $\bar{\omega}_C$, que son necesarias para resolver la Ec.(51), Ec. (52) y Ec.(53), son obtenidas de las tablas *look-up* a través de los parámetros \tilde{Z} , \tilde{Z}_{eta} y \tilde{C} .

Capítulo 2. Modelamiento numérico

El modelamiento numérico utilizado en este trabajo, incluyendo el solver y los esquemas numéricos utilizados en la discretización espacial y temporal, la configuración geométrica y malla computacional consideradas, las condiciones de inicio y contorno impuestas y el mecanismo cinético químico utilizado, son descritos en este capítulo.

2.1. Solver y esquemas numéricos

Las simulaciones numéricas son realizadas con la herramienta de CFD de código abierto OpenFOAM, versión v2006 [21]. Las ecuaciones de flujo reactivo, descritas en la sección 1.2 y 1.3, son resueltas con un solver basado en el método de volúmenes finitos (FVM) usando el algoritmo PIMPLE [35]. Las simulaciones RANS son realizadas con el solver *reactingFoam*, mientras que las simulaciones LES con el solver llamado *FPVFoam*. Además, en LES, para el almacenamiento y recuperación de los escalares termoquímicos de las tablas *look-up*, nuevas librerías vinculadas dinámicamente al solver utilizado han sido compiladas. En ambos solvers, las ecuaciones son discretizadas espacialmente utilizando el esquema numérico de segundo orden de precisión *Gausslinear*. Para la integración temporal, el esquema de primer orden *localEuler* es utilizado en las simulaciones RANS, mientras que el esquema de segundo orden transitorio *backward* es utilizado en las simulaciones LES [21]. Asimismo, debido a la fuerte relación existente entre la fracción de masa de las especies y la ecuación de energía y, por lo tanto, la densidad, para alcanzar la convergencia de la solución numérica, factores de relajación son usados en la resolución de las ecuaciones de transporte de las especies. En las simulaciones RANS, la convergencia de la solución es determinada mediante dos criterios. El primer criterio requiere que todos los residuos de las ecuaciones resueltas estén por debajo del valor de 10^{-6} . El segundo criterio de convergencia consiste en controlar la concentración de algunas especies (por ejemplo, la concentración de OH) en un lugar específico del dominio computacional, la cual debe estabilizarse y no cambiar con las iteraciones. En las simulaciones LES, un *time-step*

de $10 \mu\text{s}$ es establecido fijo asegurando un número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) menor a 0.8 en todo el dominio [35]. Los momentos estadísticos de las propiedades de interés son almacenadas después de 0.5 s de tiempo físico de simulación, equivalente a 10 *flow-throughs*. Nótese que en este contexto un *flow-through* representa el período de tiempo característico en que el fluido con la velocidad media del jet del combustible atraviesa todo el dominio. Finalmente, para determinar los resultados medios de los campos de interés, los resultados temporales obtenidos son almacenados durante 1.5 s.

2.2. Configuración geométrica y malla computacional

En la Figura 4a, el esquema de la configuración experimental utilizada para estudiar mediante técnicas de medición óptica la interacción entre la turbulencia y la combustión es mostrada [2]. El quemador *bluff-body* utilizado es relevante en varias aplicaciones de ingeniería, incluyendo problemas de combustión industrial, debido a que es capaz de estabilizar llamas en diferentes regímenes de combustión en su zona de estela. Respecto a las dimensiones del quemador, el diámetro del *jet* de combustible es 7.1 mm y del ducto de aire que rodea el *bluff-body* central, el cual tiene un diámetro de 60 mm, es 200 mm. La longitud del ducto de aire es de 1 m, aguas arriba del cual una rejilla generadora de turbulencia es utilizada [2]. En la simulación numérica, los ductos de ingreso de combustible y aire son simulados hasta una distancia de 230 mm aguas arriba de la cara del *bluff-body*, permitiendo el desarrollo del flujo [Figura 4b]. Asimismo, para evitar su influencia en la región de interés, es decir, en la estela próxima al *bluff-body*, los contornos de salida (*outlet*) del dominio computacional son posicionados lo suficientemente lejos del ingreso del jet del combustible. En la Figura 5, la sección transversal de la malla computacional 3D utilizada es mostrada. Una malla hexaédrica de 4.4 millones de celdas, generada usando la herramienta *blockMesh*, es utilizada en este trabajo. La estructura de la malla es tipo O-grid, lo cual permite que las celdas más pequeñas, con un tamaño característico de $120 \mu\text{m}$, estén ubicadas en la zona de la estela próxima al *bluff-*

body, donde tasas de deformación significativas ocurren, mientras que las celdas más grandes, con un tamaño de 5 mm, están ubicadas a una distancia radial lejana del eje axisimétrico. La no-ortogonalidad es un parámetro importante para medir la calidad de la malla. Usando el comando *checkMesh*, el valor máximo de la no-ortogonalidad de la malla es 15° , que es menor a los valores máximos recomendados, $30^\circ - 40^\circ$. Un valor de y^+ menor a 1 es obtenido a lo largo de la pared aguas arriba del *bluff-body*, permitiendo capturar correctamente el desarrollo y desprendimiento de la capa límite en el ducto de ingreso del aire.

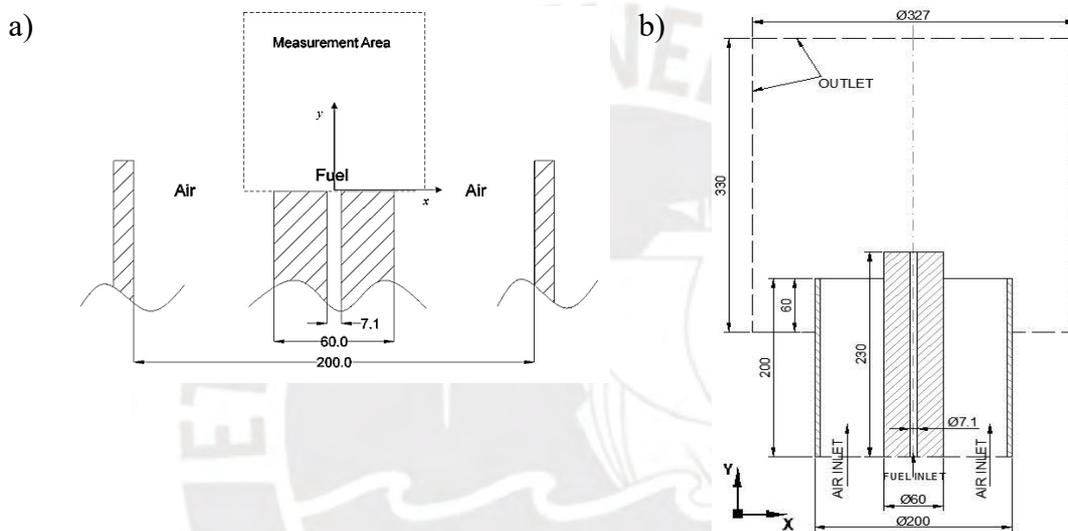


Figura 4. a) Esquema del quemador tipo *bluff-body* con dimensiones en mm usado en los experimentos realizados por Caetano y Figueira da Silva [2]. b) Dominio computacional con dimensiones en mm.

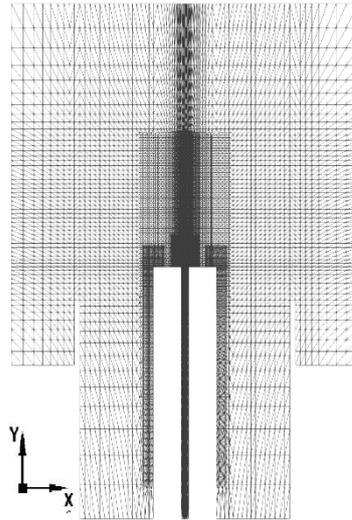


Figura 5. Sección transversal de la malla computacional 3D.

2.3. Condiciones iniciales y de contorno

El *jet* del combustible incluye metano CH_4 (100%) a una temperatura de 300 K y una velocidad media de flujo de 5.3 m/s (número de Reynolds de aproximadamente 2428). La corriente de co-flujo es caracterizado por una velocidad de flujo media de 8 m/s, una energía cinética turbulenta media de $0.92 \text{ m}^2/\text{s}^2$, una temperatura de 300 K y una composición molar de un 79% de N_2 y un 21% de O_2 . Las velocidades de ingreso de combustible y aire son especificadas en los contornos de entrada *fuelInlet* y *airInlet*, respectivamente. Una condición de no deslizamiento *noSlip* es aplicada para la velocidad en las paredes \mathbf{U}_P [Ec. (54)],

$$\mathbf{U}_P = (u_i, u_j, u_k)_P = (0,0,0). \quad (54)$$

Una condición de presión de *zeroGradient* es establecida para las entradas [Ec. (55)], mientras que la presión de salida es establecida en 10^5 Pa en los contornos de salida,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = 0, \quad (55)$$

donde φ es el escalar con la condición de contorno. En las simulaciones RANS, para la temperatura y la fracción de masa de las especies, una condición de *zeroGradient* es establecida

en las entradas, salida y paredes [Ec. (55)]. Las funciones de pared *kLowReWallFunction* y *omegaWallFunction* son aplicados para la energía cinética turbulenta \tilde{k} y la frecuencia turbulenta $\tilde{\omega}$, respectivamente [21]. Los valores de entrada para \tilde{k} y $\tilde{\omega}$ son calculados para una intensidad de turbulencia de 5% en el co-flujo. En las simulaciones LES, la fracción de mezcla filtrada \tilde{Z} es establecida como 1 y 0 en las entradas de combustible y aire, respectivamente. Además, tanto la varianza sub-malla de la fracción de mezcla \tilde{Z}''^2 como la variable de progreso filtrada \tilde{C} han sido establecidas como 0 en ambas entradas, y una condición de *zeroGradient* es aplicada en todas las paredes [Ec. (55)]. La turbulencia de ingreso del co-flujo es generado utilizando el método de turbulencia sintética DFSEM (*divergence-free synthetic eddy*) [29] con una amplitud de 5% de la velocidad media.

2.4. Mecanismo de cinética química

El mecanismo de cinética química utilizado para describir la combustión en fase gaseosa del combustible (metano) es el GRI-Mech 3.0 [31]. Este mecanismo incluye 53 especies químicas y 325 reacciones. Este mecanismo ha sido optimizado y ampliamente validado para el metano como combustible y ha sido empleado en el pasado en la simulación numérica de diferentes llamas turbulentas [8].

Capítulo 3. Resultados y discusiones

Los principales resultados numéricos obtenidos en este trabajo usando los modelos RANS EDC y LES FPV son presentados y discutidos en este capítulo. Más concretamente, los campos de velocidad y energía cinética turbulenta, así como los tensores de Reynolds y la especie química OH, son analizados detalladamente vía comparaciones con los datos experimentales disponibles. Los referidos resultados son discutidos en términos cualitativos y cuantitativos. Asimismo, en el modelo LES FPV, el estudio para verificar la calidad de los *flamelets* generados en la etapa de pre-procesamiento es inicialmente descrito.

3.1. Análisis del flujo en el caso RANS-EDC

3.1.1. Campos medios de velocidad

Contornos experimentales y numéricos de las componentes axial U_y y radial U_x de la velocidad media son mostrados en la Figura 6. En esta figura, en las imágenes de la parte superior, la forma del contorno de U_y obtenido numéricamente es bastante diferente respecto al experimental, siendo la discrepancia principal el nivel de penetración del jet del combustible. Así, en el experimento, el nivel de penetración es más alto, lo cual indica un nivel de arrastre mayor del co-flujo por el *jet* del combustible. Esta diferencia es observada en la Figura 7a donde el perfil de U_y a lo largo del eje axial $x/D = 0$ es mostrado. Aquí, en el modelo EDC, la penetración del *jet* del combustible es hasta $y = 40 \text{ mm}$, donde ocurre el punto de estancamiento, y luego un cambio en la dirección de la velocidad axial es observado, llegando hasta un valor de -2.5 m/s en $y = 45 \text{ mm}$. Mientras tanto, en el experimento, la penetración del jet del combustible es hasta $y = 70 \text{ mm}$, donde ocurre el punto de estancamiento, pero no hay en este caso un cambio en la dirección de la velocidad axial. También es importante notar que, debido a limitaciones del modelo de turbulencia, la velocidad axial de ingreso del *jet* de combustible obtenida, 8.5 m/s , es 5.5 % menor que la del experimento, 9 m/s . Luego, aguas

abajo, en la región de interés $0 < y < 80 \text{ mm}$, la tasa con la que disminuye la velocidad axial del *jet* de combustible es mayor, perfil con pendiente más pronunciada, obteniendo un punto de estancamiento 30 mm aguas abajo del experimento. En la Figura 6, en las imágenes de la parte inferior, la forma del contorno U_x presenta características generales que tienen discrepancias con el experimento. Así, dentro de la zona de recirculación formada aguas abajo de la cara del *bluff-body*, tanto en el resultado numérico como en el experimento, existe la presencia de una estructura de vórtice doble, que controla el flujo y el patrón de mezcla. Sin embargo, la mayor discrepancia en este caso está relacionada con la ubicación del vórtice interior, el cual está comprendido entre el *jet* del combustible y el vórtice exterior.

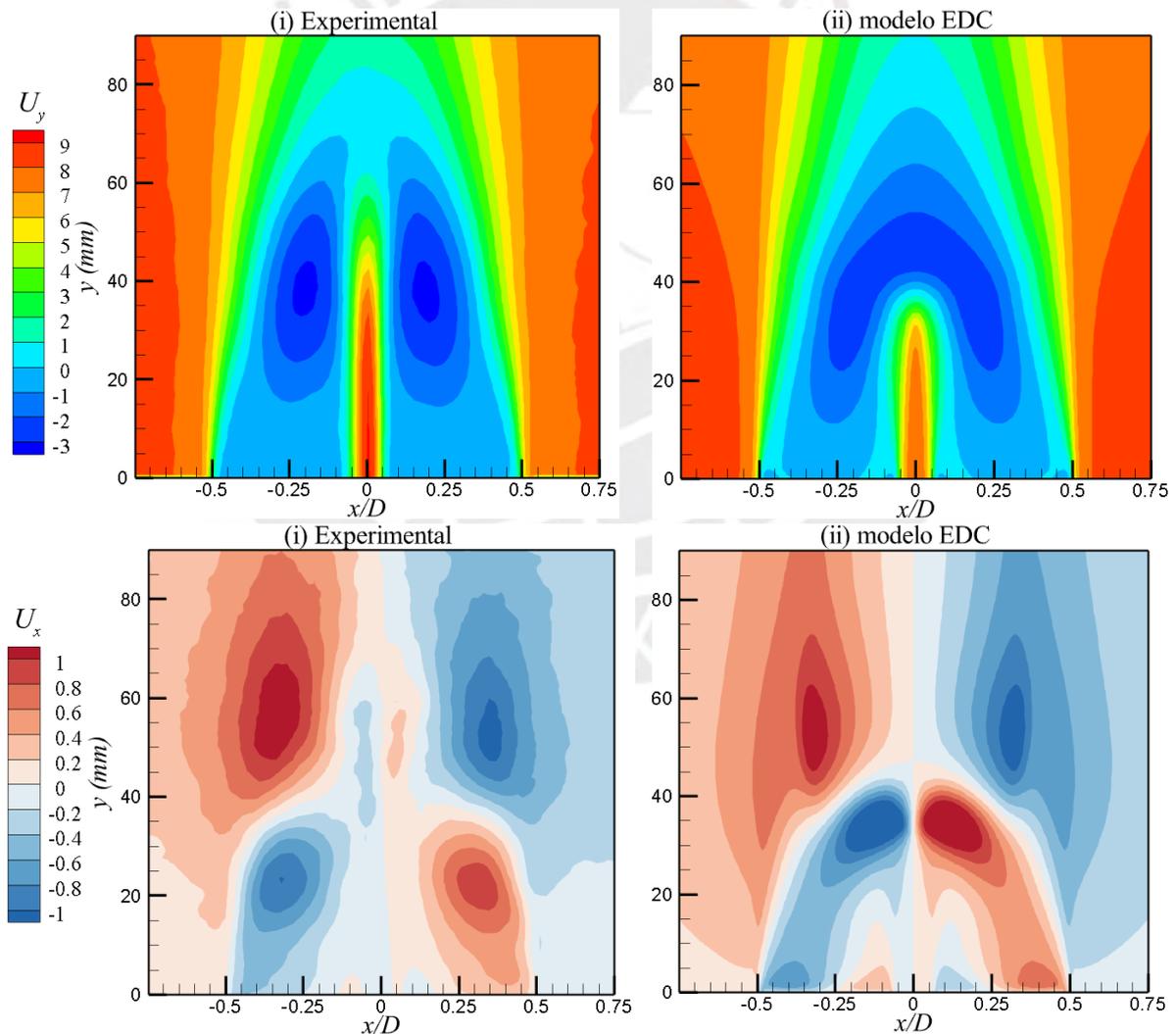


Figura 6. Contornos (i) experimentales y (ii) numéricos de las componentes axial U_y (superior) y radial U_x (inferior) de la velocidad media.

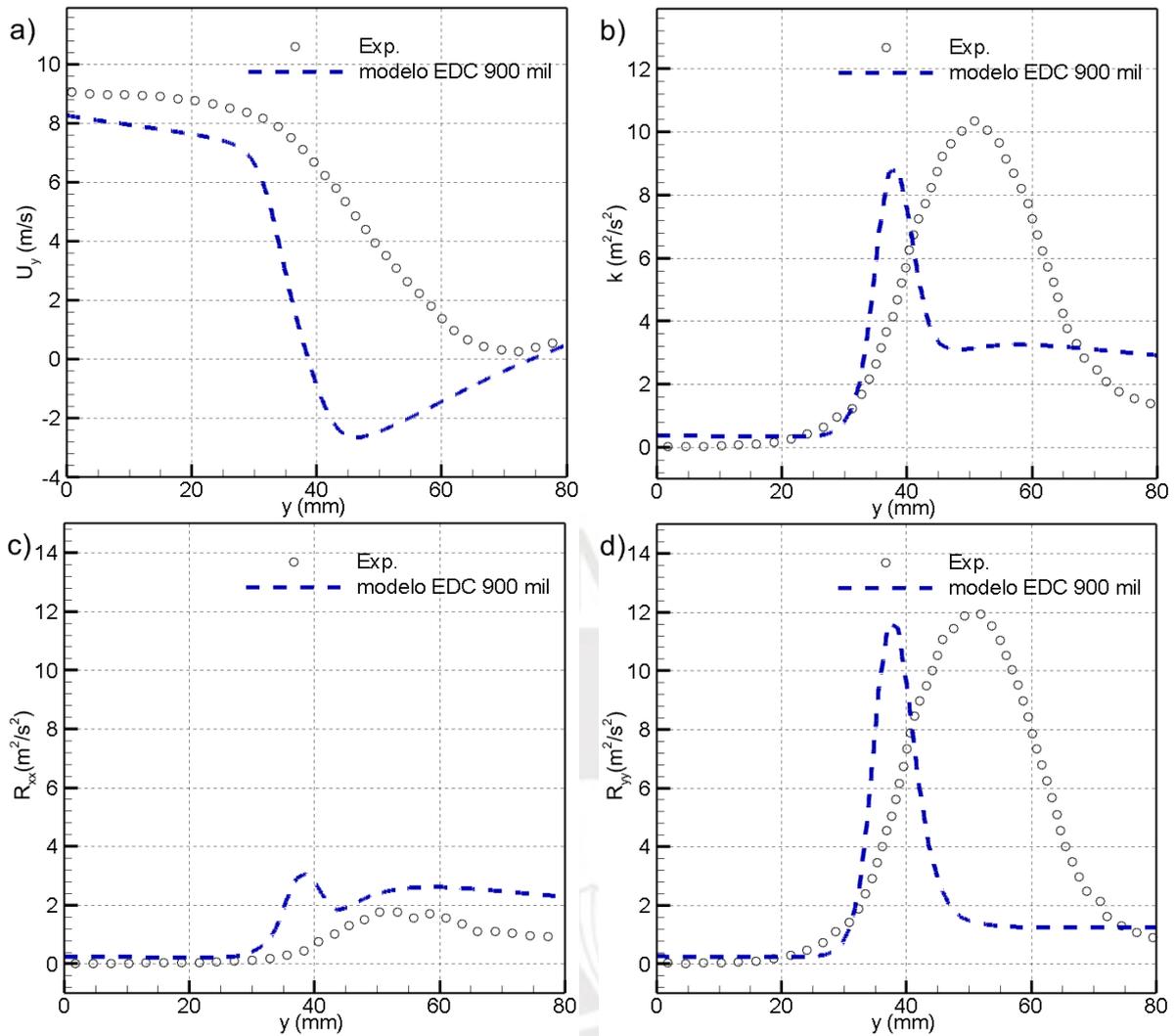


Figura 7. Perfiles de (a) velocidad axial media U_y , (b) energía cinética turbulenta k , (c) tensor de Reynolds normal radial R_{xx} y (d) tensor de Reynolds normal axial R_{yy} a lo largo del eje axial.

Perfiles radiales de las componentes axial U_y y radial U_x de la velocidad media en diferentes posiciones axiales dentro de la zona de recirculación, aguas abajo de la cara del *bluff-body*, son mostrados en la Figura 8. Los resultados obtenidos de U_y y U_x siguen la tendencia de una estructura de vórtice doble, pero presentan valores bastante diferentes a las mediciones experimentales. De esta manera, como es esperado, debido a la discrepancia en la profundidad de penetración del *jet* del combustible, en $y = 50$ mm, en la posición del eje axial $x/D = 0$, la velocidad axial media U_y obtenida (-2 m/s) es menor a la medida experimentalmente

(4 m/s) por una diferencia de 6 m/s. Para la velocidad radial media U_x , debido a la discrepancia en la ubicación del vórtice interior en la zona de recirculación, en $y = 30$ mm, las posiciones de los valores máximos y mínimos U_x obtenidos presentan también discrepancias con respecto a las mediciones experimentales.

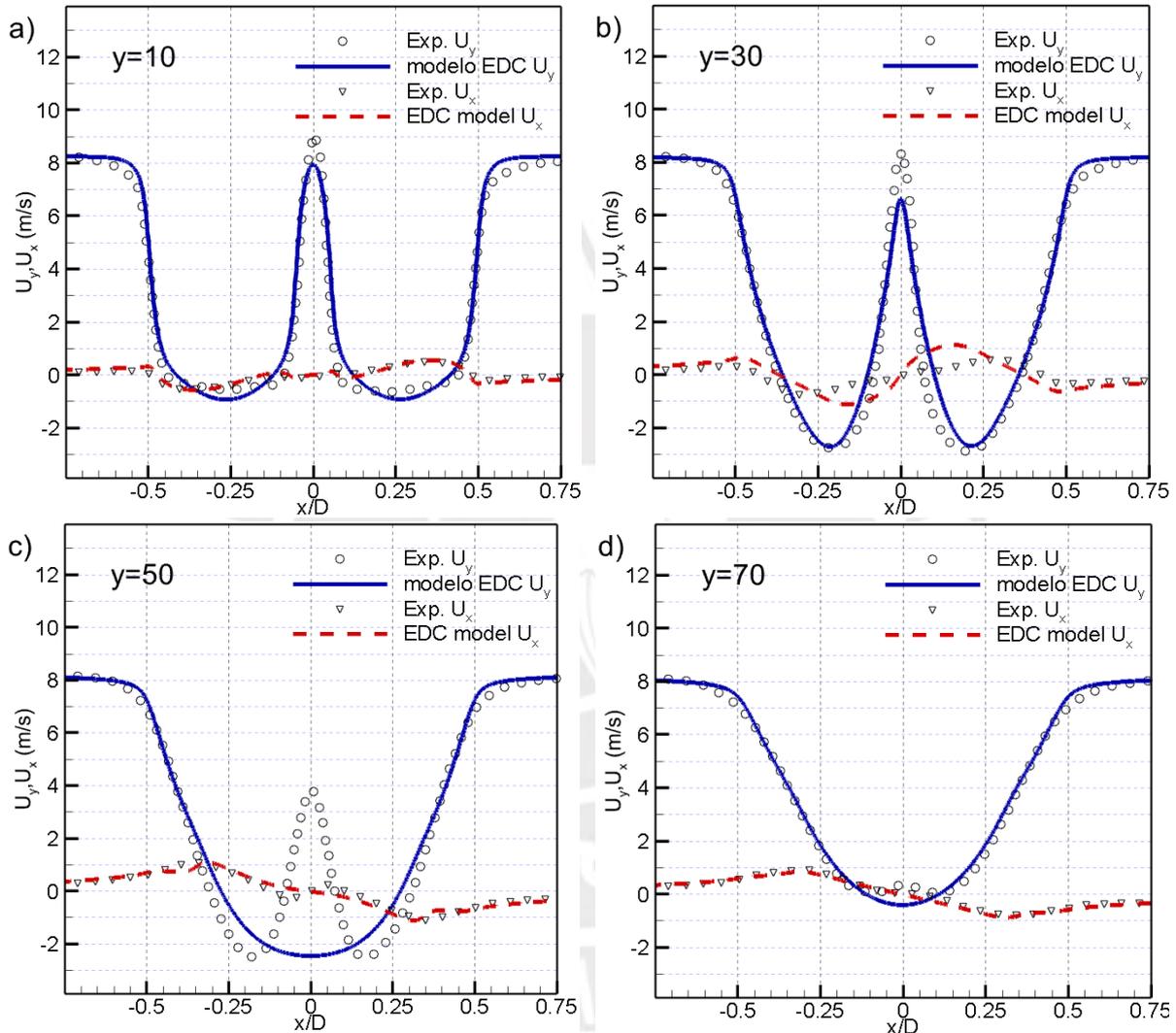


Figura 8. Perfiles radiales de las componentes (—) axial U_y y (- -) radial U_x de la velocidad media en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70$ mm.

3.1.2. Tensores de Reynolds y energía cinética turbulenta

Contornos de las componentes radial R_{xx} y axial R_{yy} del tensor de Reynolds normal son mostrados en la Figura 9. Por un lado, la forma del contorno de R_{yy} tiene relación con la experimental, donde los máximos valores ocurren en la zona de estancamiento del *jet* de

combustible. Por otro lado, la forma del contorno de R_{xx} muestra que los valores numéricos obtenidos son mayores a los experimentales en toda la zona de interés. Respecto a los perfiles de R_{yy} y R_{xx} a lo largo del eje axial $x/D = 0$, discrepancias de los tensores de Reynolds normales con los resultados experimentales son observadas en la Figura 7, donde R_{yy} y R_{xx} poseen una tendencia a aumentar conforme U_y disminuye, hasta alcanzar valores máximos de $12 \text{ m}^2/\text{s}^2$ y $3 \text{ m}^2/\text{s}^2$, respectivamente, en el punto de estancamiento del jet de combustible, $y = 40 \text{ mm}$, donde altas fluctuaciones y cambio de dirección de velocidad ocurren. Asimismo, debido a que la energía cinética turbulenta k está en función de los tensores de Reynolds normales, k tiene una tendencia creciente a lo largo del eje axial y alcanza su valor máximo de $9 \text{ m}^2/\text{s}^2$ en $y = 40 \text{ mm}$. Sin embargo, en el experimento, los valores máximos de R_{yy} , R_{xx} y k ocurren en $y = 50 \text{ mm}$ que está ubicado 20 mm aguas arriba del punto de estancamiento, $y = 70 \text{ mm}$.

En la Figura 10, perfiles radiales de R_{xx} y R_{yy} en las posiciones axiales $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$ son mostrados. Es observado que R_{xx} presenta valores numéricos bastante mayores a los experimentales en todas las posiciones axiales. Así, en $y = 30 \text{ mm}$, una discrepancia mayor con el experimento es observado en la zona de recirculación $0 < |x/D| < 0.5$, donde el valor máximo obtenido de $4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es 4 veces mayor que el experimental, $1 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Asimismo, es observado que R_{yy} presenta discrepancias en la zona de recirculación en las posiciones axiales $y = 10 \text{ mm}$ y $y = 30 \text{ mm}$, y en la zona próxima a $x/D = 0$, en $y = 50 \text{ mm}$ y $y = 70 \text{ mm}$. Así, en la posición más próxima a la cara del *bluff-body*, $y = 10 \text{ mm}$, en la zona de recirculación, el valor máximo obtenido es $2 \text{ m}^2/\text{s}^2$, el cual es 2 veces el valor experimental, $1 \text{ m}^2/\text{s}^2$. En las posiciones aguas abajo, $y = 50 \text{ mm}$ y $y = 70 \text{ mm}$, la tendencia de los valores numéricos obtenidos en la zona de recirculación tiene cierta relación con los perfiles experimentales. Sin embargo, los valores numéricos obtenidos en la zona próxima a

$x/D = 0$ presentan discrepancias respecto a las mediciones experimentales. Así, en $y = 50 \text{ mm}$, la mayor discrepancia es observada en $x/D = 0$, donde el valor obtenido de $1 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es comparado con el valor experimental de $12 \text{ m}^2/\text{s}^2$. De manera general, R_{xx} y R_{yy} presentan valores numéricos y tendencias bastante diferentes a los perfiles experimentales.

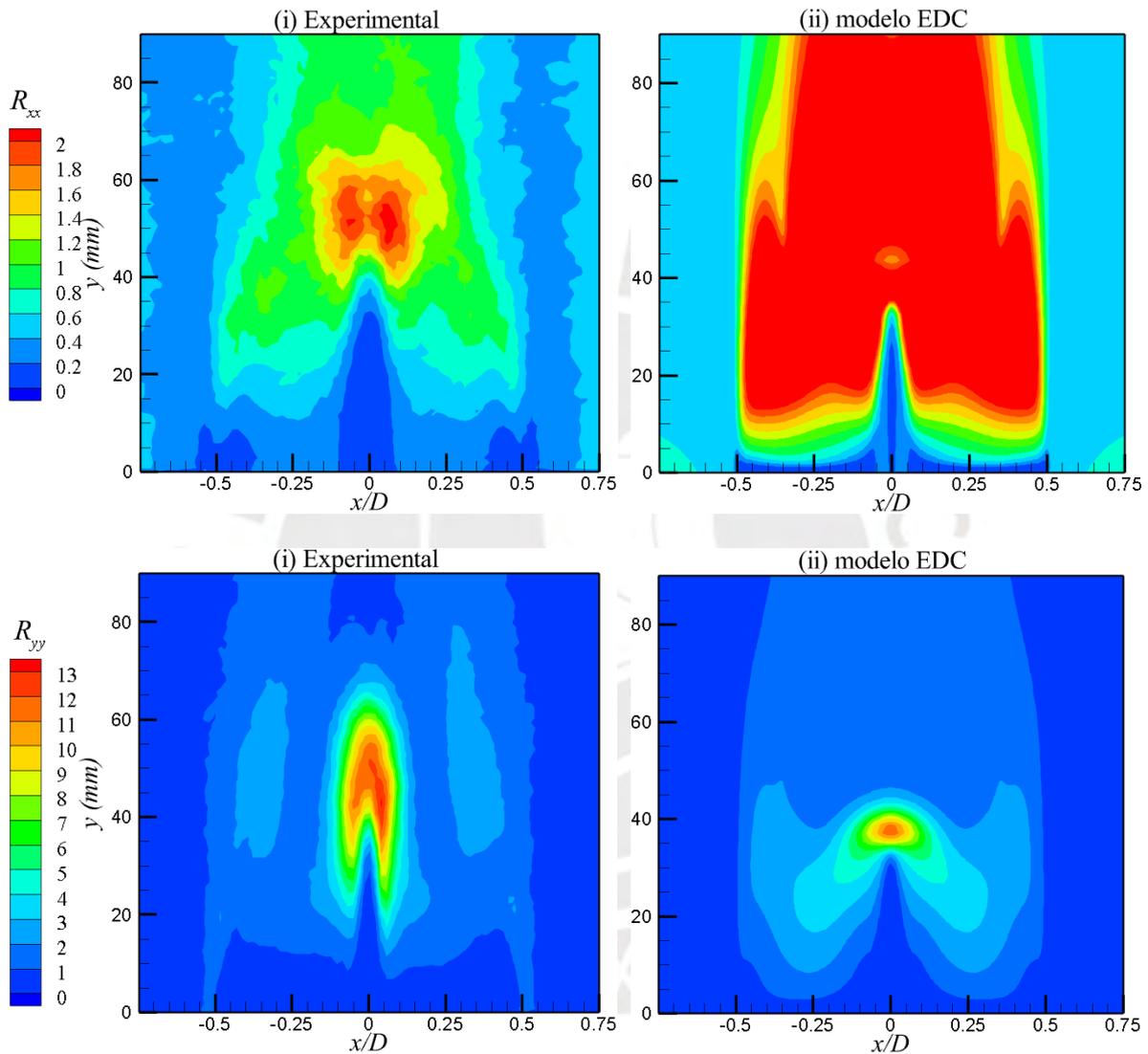


Figura 9. Contornos (i) experimentales y (ii) numéricos de las componentes radial R_{xx} (superior) y axial R_{yy} (inferior) del tensor de Reynolds normal.

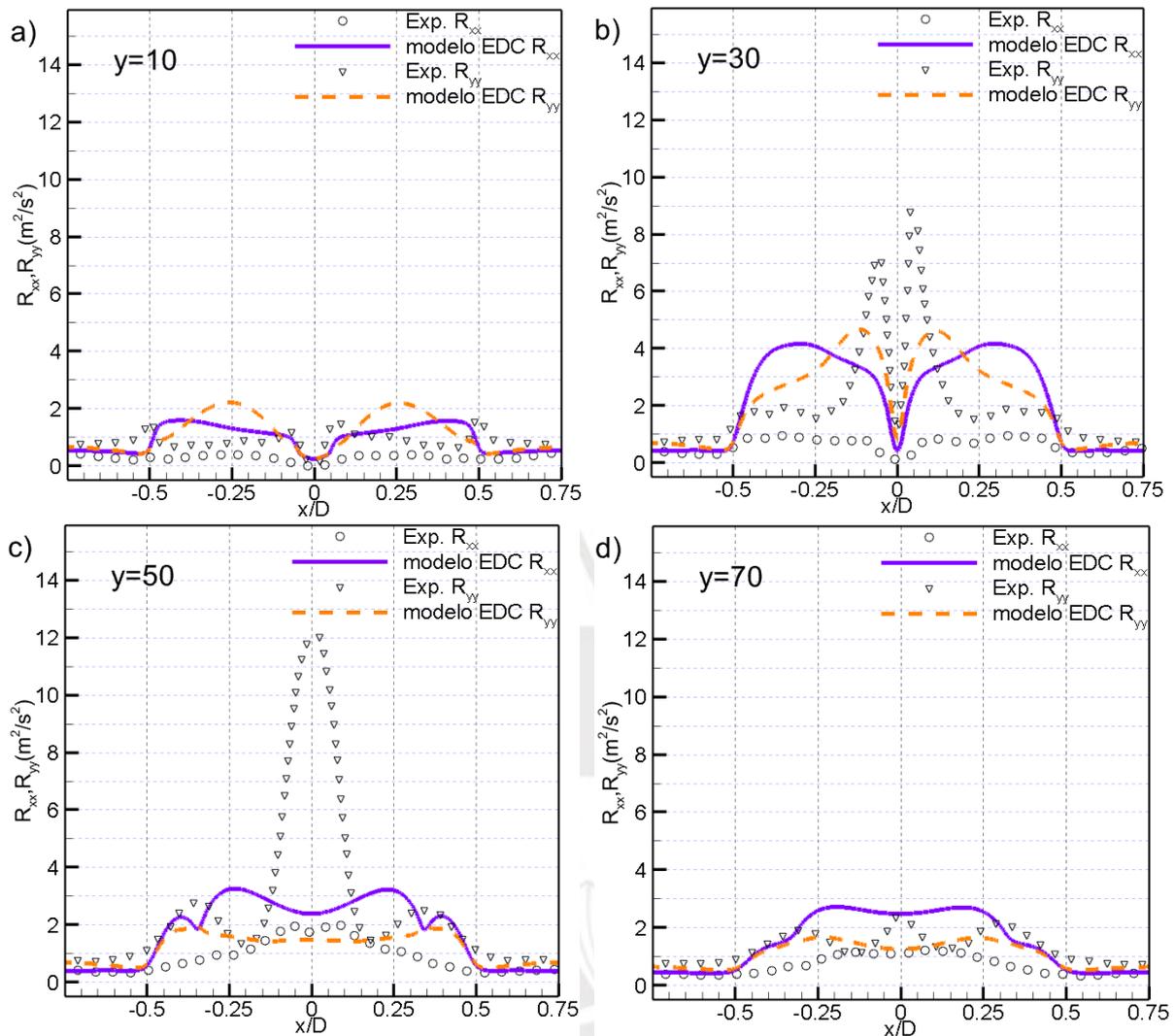
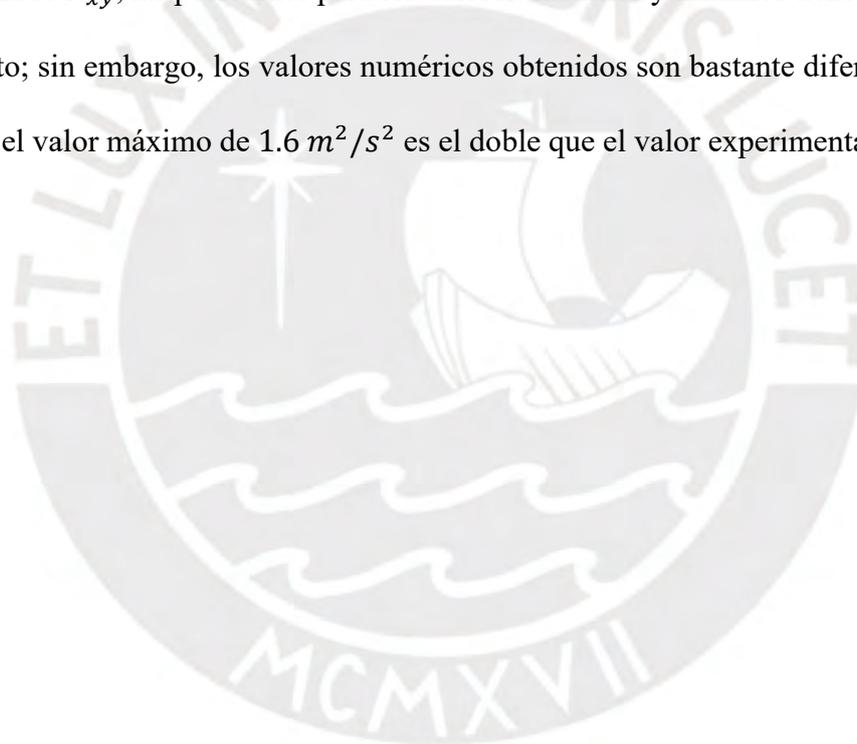


Figura 10. Perfiles radiales de las componentes (—) radial R_{xx} y (- -) axial R_{yy} del tensor de Reynolds normal en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$.

Contornos de energía cinética turbulenta k y de tensor de Reynolds cruzado R_{xy} son mostrados en la Figura 11. Debido a que k es definida en función a los tensores de Reynolds normal, la forma del contorno de k , siguiendo a R_{xx} y R_{yy} , presenta valores máximos en la zona del punto de estancamiento del *jet* del combustible y una cantidad mayor de energía en la zona de recirculación. Por lo tanto, los valores obtenidos de R_{xx} que son superiores a los valores experimentales en la zona de recirculación afectan negativamente a la energía cinética turbulenta. Asimismo, la forma del contorno de R_{xy} es diferente al resultado experimental. En la Figura 12, perfiles radiales de la energía cinética turbulenta k y el tensor de Reynolds cruzado

R_{xy} en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70 \text{ mm}$ son mostrados. Es observado que los resultados obtenidos para k muestran fuertes discrepancias con el experimento en todas las posiciones axiales. Una de las discrepancias es que valores superiores al experimento son observados en la zona de recirculación. Así, en $y = 30 \text{ mm}$, para $0 < |x/D| < 0.5$, el valor máximo obtenido de $5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es 2.5 veces más que el experimental, $2 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Debido a que el punto de estancamiento del *jet* de combustible obtenido está ubicado aguas arriba que el experimental, en $y = 50 \text{ mm}$, un valor de $3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es obtenido en $x/D = 0$, mientras que el valor experimental alcanza un máximo de $11 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Asimismo, respecto al tensor de Reynolds cruzado R_{xy} , las posiciones para los valores máximos y mínimos tienen relación con el experimento; sin embargo, los valores numéricos obtenidos son bastante diferentes. Así, en $y = 30 \text{ mm}$, el valor máximo de $1.6 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es el doble que el valor experimental, $0.8 \text{ m}^2/\text{s}^2$.



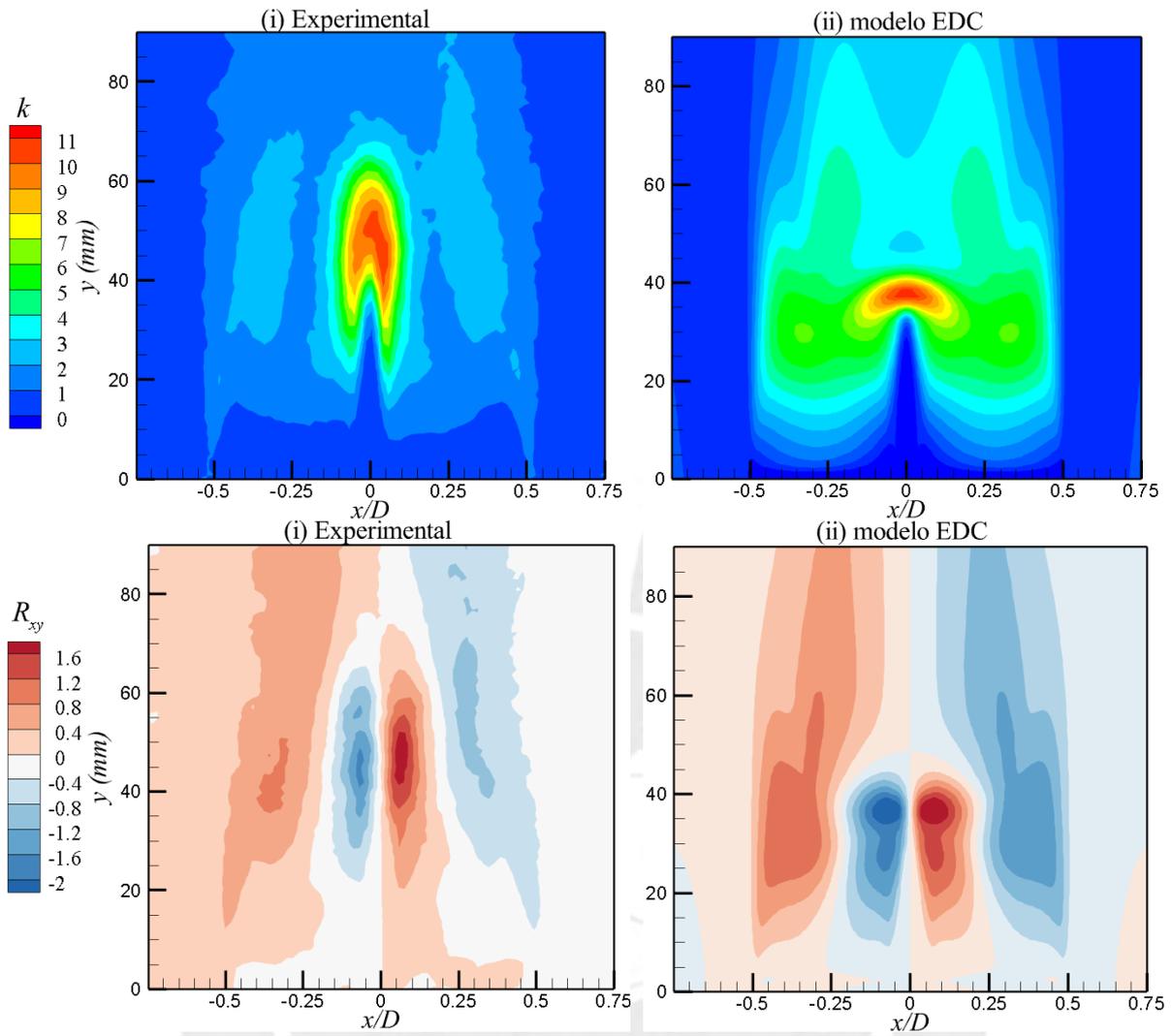


Figura 11. Contornos i) experimentales y ii) numéricos de la energía cinética turbulenta k (superior) y el tensor de Reynolds cruzado R_{xy} (inferior).

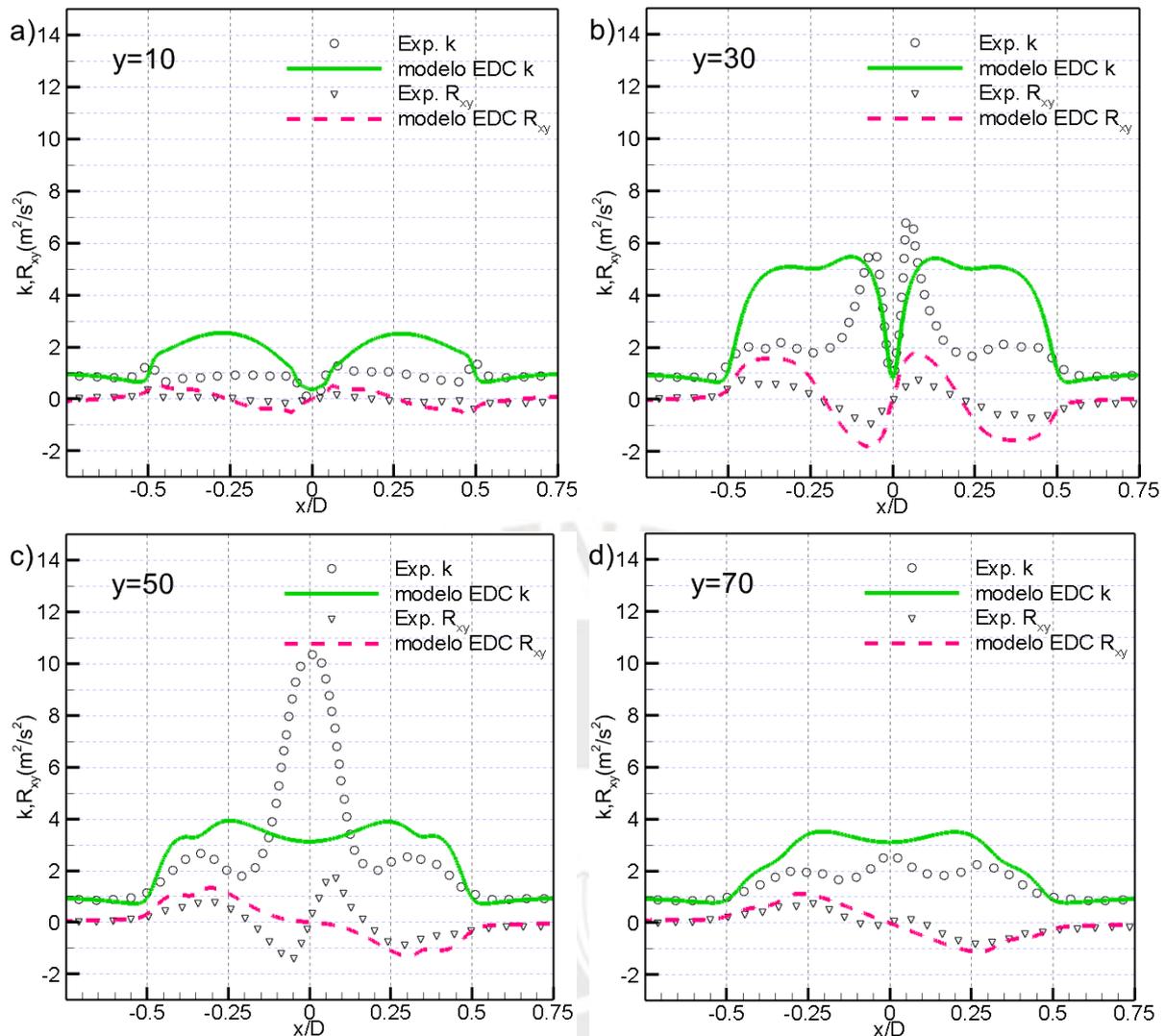


Figura 12. Perfiles radiales de (—) la energía cinética turbulenta k y (- -) el tensor de Reynolds cruzado R_{xy} en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70$ mm.

3.1.3. Distribución y perfiles OH

El radical hidroxilo OH es una especie química de interés para evaluar el modelo de combustión. La comparación cualitativa del contorno de OH es mostrado en la Figura 13, donde las características generales del ancho y la forma de OH son bastante diferentes en relación al experimento. Una discrepancia observada es que los resultados numéricos obtenidos muestran, a diferencia del experimento, que no existe una cantidad a considerar de OH aguas abajo de $y = 40$ mm. En la Figura 14, la comparación de los perfiles de OH en cuatro posiciones axiales $y = 10, 30, 50, 70$ mm son mostradas. En $y = 10$ mm, tanto en los

resultados numéricos como en los experimentales, la cantidad de OH es casi 0. Aguas arriba, en $y = 30 \text{ mm}$, la cantidad de OH obtenida continúa siendo cero, sin embargo, en las mediciones experimentales existe una cantidad de OH considerable en esta posición axial. En $y = 50 \text{ mm}$, debido a la discrepancia del punto de estancamiento obtenido, una cantidad considerable de OH, cuyo valor es la mitad del valor máximo, es obtenido en la zona central $x/D = 0$, mientras que el OH formado en el experimento es 0 debido a que en esta posición solo está presente el jet del combustible, sin mezclarse con oxidante, y por lo tanto sin reacción. También, en la zona de recirculación, valores máximos bastante cercanos al experimental son obtenidos. En la posición más alejada de la cara del *bluff-body*, $y = 70 \text{ mm}$, la cantidad de OH en $x/D = 0$ es bien predicha, mientras que en la zona de recirculación esta cantidad es menor que los valores experimentales. Debido a que el ancho de la zona de presencia de OH obtenida es menor que el experimental, tanto en $y = 50 \text{ mm}$ como en $y = 70 \text{ mm}$, la presencia de OH ocurre a partir de la posición radial $|x/D| = 0.35$, mientras que en el experimento comienza a ocurrir a partir de $|x/D| = 0.6$.

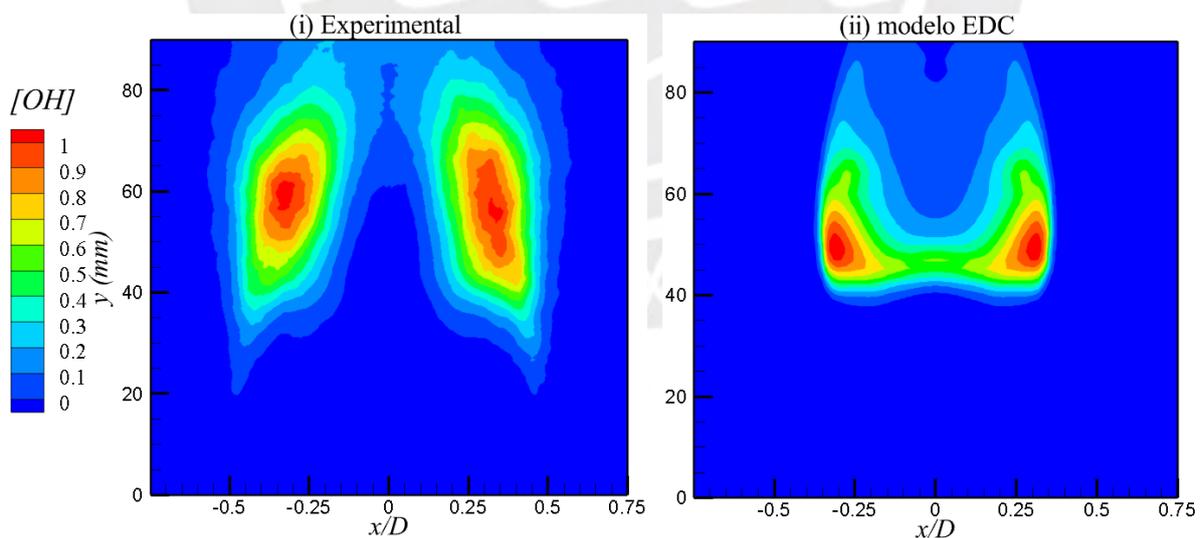


Figura 13. Contornos i) experimental y ii) numérico de OH.

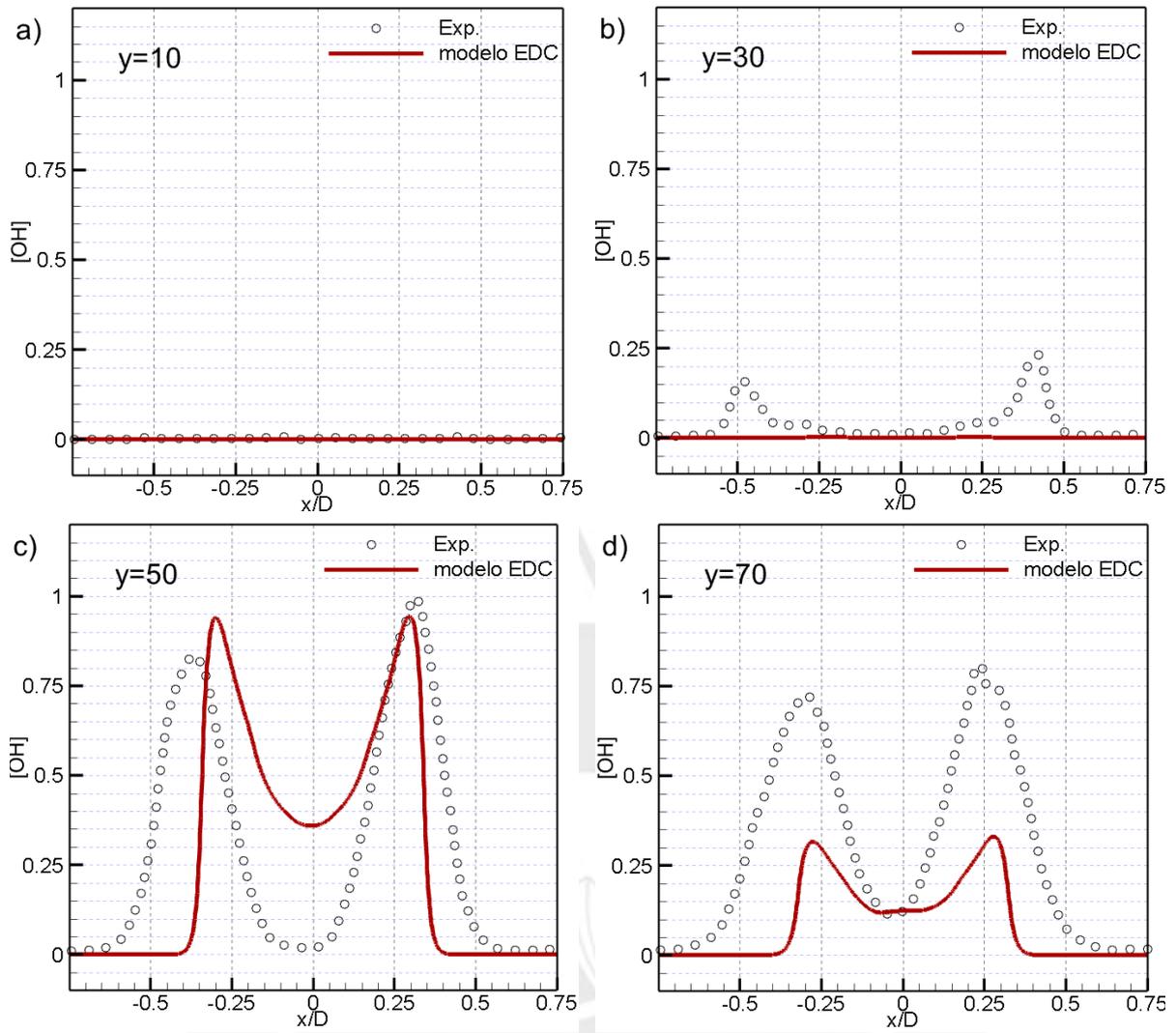


Figura 14. Perfiles radiales de OH en posiciones axiales fijas de $y = 10, 30, 50, 70$ mm.

3.2. Análisis del flujo en el caso LES-FPV

3.2.1. Generación y calidad de *flamelets*

Todos los perfiles de *flamelets* utilizados en este trabajo han sido generados usando el código FlameMaster [26], resolviendo las ecuaciones de *flamelet* [Ec. (39)]. Las soluciones obtenidas de estas ecuaciones son representadas mediante la denominada curva en forma de S [Figura 15a], que representa la temperatura estequiométrica de la llama en función de la tasa de disipación escalar estequiométrica. En la referida figura, tres ramas de soluciones son identificados, (i) la rama superior de reacción estable, (ii) la rama intermedia de reacción inestable, y (iii) la rama inferior de estados completamente extinguidos. El punto de inflexión entre las ramas superior e intermedia ocurre en la tasa de disipación escalar estequiométrica correspondiente al límite de extinción $\chi_{st,q}$, aproximadamente igual a 30 s^{-1} . Un total de 181 perfiles de *flamelet* (100 pertenecientes a los estados de reacción estable, 80 a los de reacción inestable y 1 a los de extinción completa) han sido proporcionados como entradas a las herramientas de pre-procesamiento que generan las tablas *look-up* utilizadas para resolver los escalares termoquímicos filtrados.

Como es observado en la Figura 15b, los perfiles *flamelet* generados consisten en una zona delgada de reacción difusiva caracterizada por un alto gradiente de temperatura alrededor de la fracción estequiométrica de la mezcla, $Z_{st} = 0.055$. A medida que aumenta la deformación χ_{st} en los *flamelets*, las temperaturas máximas en cada llama disminuyen debido a que las pérdidas de calor hacia las regiones exteriores de la zona de reacción son mayores que la cantidad de calor liberada por la reacción misma. Los *flamelets* llegan a extinguirse finalmente cuando la tasa de deformación alcanza el límite de extinción $\chi_{st,q}$, lo que da lugar a una mezcla inerte de los reactivos. Los estados de reacción inestable identificados con líneas discontinuas en la Figura 2b proporcionan una transición suave desde las condiciones de

reacción estable hasta las de extinción completa. Cabe destacar también que, para describir adecuadamente las curvas de solución de los *flamelets*, un número de puntos igual a 160 con una relación de cambio de pendiente y curvatura máximas de 0.2 y 0.3, respectivamente, ha sido utilizado. Además, el número de *flamelets* (181) ha sido definido de manera que la diferencia entre 2 valores consecutivos para cada escalar termoquímico analizado sea inferior al 2%.

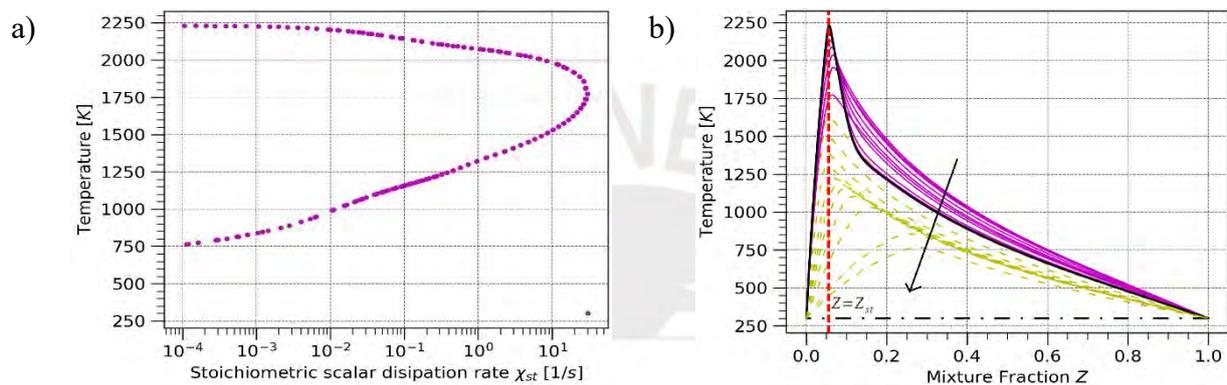


Figura 15. Soluciones de flamelet. Temperatura como una función de a) χ_{st} en la fracción de mezcla estequiométrica $Z_{st} = 0.055$, y b) fracción de mezcla con estados de (—) reacción estable, (- -) reacción inestable y (-.-) extinción completa.

3.2.2. Campos medios de velocidad

La comparación cualitativa de los contornos de las velocidades medias axiales U_y y radiales U_r obtenidos numéricamente con los experimentales es mostrada la Figura 16. En esta figura, la estructura del flujo medio calculado es similar al medido. En particular, la profundidad de penetración del *jet* de combustible, la propagación de la estela y las posiciones del vórtice interior cerca del *jet* de combustible y el exterior entre el vórtice interior y el aire de co-flujo son calculados bastante bien. A su vez, en términos cuantitativos, la Figura 17 muestra que a lo largo de la línea central, $x/D = 0$, el comportamiento de la velocidad axial media concuerda también con los datos experimentales. Sin embargo, aguas abajo, cerca del punto de estancamiento, la velocidad axial del *jet* central no disminuye tan rápidamente como

en el experimento [Figura 17]. Por lo tanto, la ubicación del punto de estancamiento calculado es desplazada hacia aguas abajo, $y = 80 \text{ mm}$, en comparación con la observada en los datos experimentales, $y = 70 \text{ mm}$ [Figura 17].

Además, la Figura 18 muestra una comparación detallada de los perfiles de velocidad media axial y radial en cuatro posiciones diferentes correspondientes a y iguales a 10, 30, 50, 70 mm , donde y es la distancia axial desde la cara del *bluff-body* (aguas abajo). Como es observado en esta figura, la concordancia entre los resultados calculados y los datos experimentales es cercana. En $y = 10 \text{ mm}$, por ejemplo, tanto la velocidad media radial como la axial coinciden con el experimento. Para todas las posiciones axiales aguas abajo de $y = 10 \text{ mm}$, la ubicación de la velocidad axial media mínima dentro de la zona de recirculación $0 < |x/D| < 0.5$ también coincide con el experimento. Sin embargo, el pico más bajo de la velocidad axial media está significativamente por encima del experimento. Por ejemplo, en $y = 30 \text{ mm}$ la velocidad axial obtenida es igual a -0.5 m/s pero los datos experimentales indican -2.5 m/s . Asimismo, los picos máximos y mínimos de la velocidad radial media están por encima del experimento, pero sus ubicaciones están en general bien determinadas. Para explicar las tendencias mencionadas, a continuación, la discusión sobre las componentes normales del tensor de Reynolds y la energía cinética turbulenta a lo largo de la línea central del quemador es desarrollada.

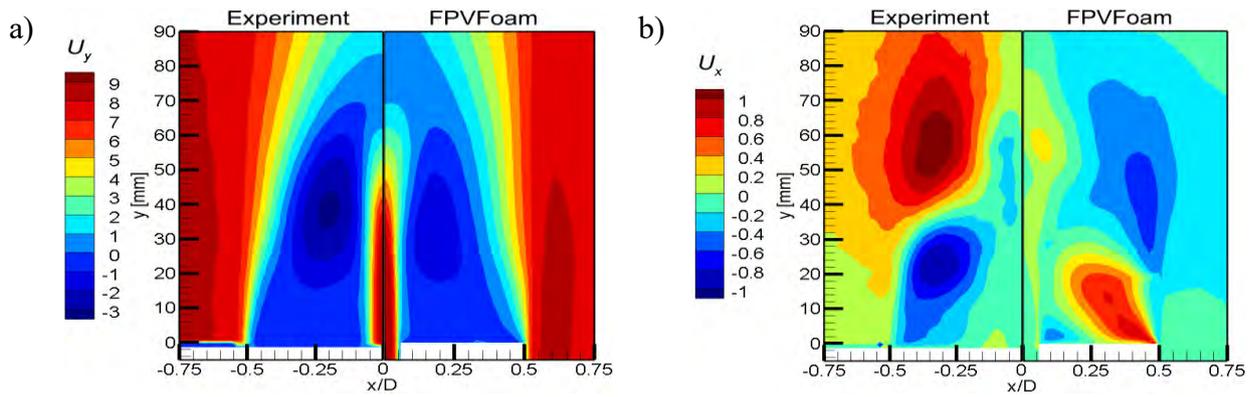


Figura 16. Contornos de las componentes a) axial (U_y) y b) radial (U_x) de la velocidad

media (m/s).

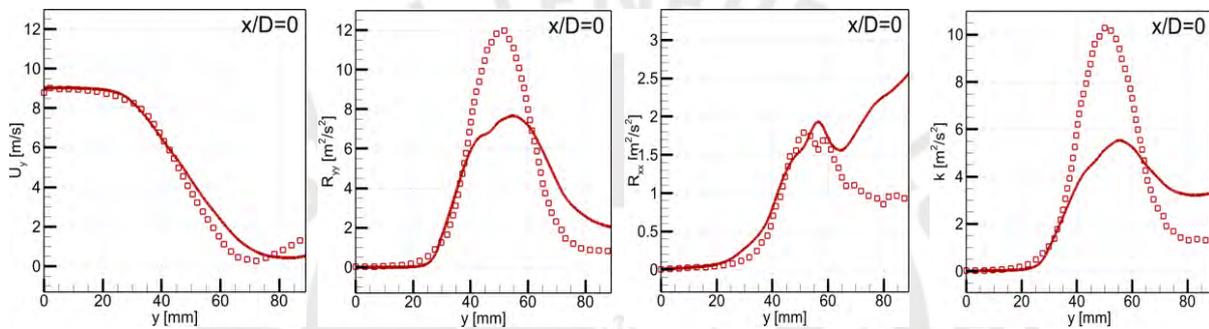


Figura 17. Comparación de la velocidad axial media calculada U_y , las componentes normales del tensor de tensión de Reynolds R_{yy} , R_{xx} y la energía cinética turbulenta k (líneas sólidas) con los datos experimentales (símbolos \square) a lo largo del eje axial.

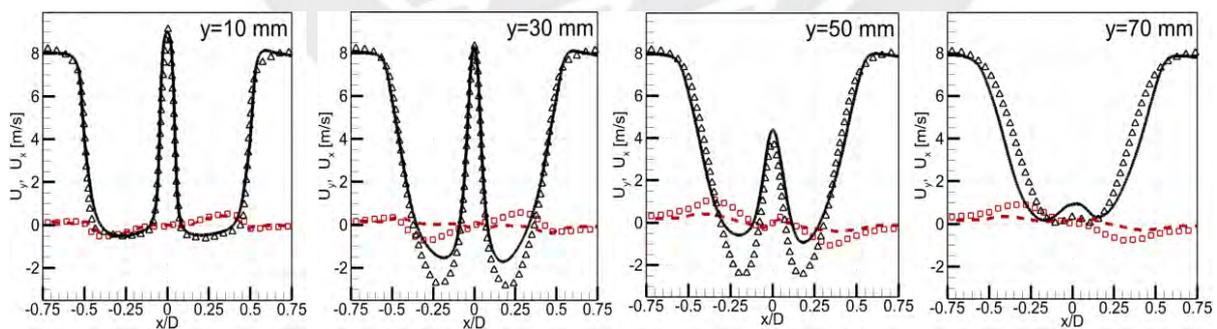


Figura 18. Comparación de la velocidad media calculada axial U_y (líneas sólidas) y radial U_x (líneas discontinuas) con los resultados experimentales (axial y radial, símbolos Δ y \square , respectivamente) en diferentes posiciones axiales fijas.

3.2.3. Tensores de Reynolds y energía cinética turbulenta

En la Figura 19, las comparaciones en términos cualitativos de los componentes del tensor de Reynolds R_{yy} , R_{xx} y R_{xy} y la energía cinética turbulenta k son mostradas. Aquí, la estructura del flujo calculada, en términos de R_{yy} , R_{xy} y k , es bastante similar a los datos experimentales. Con respecto a R_{xx} [Figura 19b], hasta $y = 60 \text{ mm}$, una distribución cualitativamente similar al experimento es observada, sin embargo, aguas abajo de este punto, algunas grandes discrepancias entre los resultados numéricos y experimentales son observadas. Cuantitativamente, a lo largo de la línea central del quemador, la Figura 17 muestra que las componentes normales del tensor de Reynolds R_{xx} y R_{yy} , y la energía cinética turbulenta k , presentan en general tendencias similares a las que caracterizan los datos experimentales. Debido a la intensa turbulencia resultante de la ruptura del jet del combustible dentro de la región del vórtice, los valores de R_{xx} , R_{yy} y k aumentan hasta la posición axial $y = 50 \text{ mm}$, donde alcanzan un valor máximo y luego disminuyen aguas abajo de este punto. La ubicación de los valores máximos de R_{xx} , R_{yy} y k en torno a $y = 50 \text{ mm}$ son calculados correctamente. El valor máximo de R_{xx} calculado, de $1.8 \text{ m}^2/\text{s}^2$, concuerda con los resultados experimentales, mientras que los valores máximos de R_{yy} y k son menores que el experimento. También, en la Figura 17, aguas abajo de $y = 60 \text{ mm}$, R_{xx} tiende a aumentar, mientras que en los datos experimentales este parámetro es casi constante. Además, aguas abajo de $y = 70 \text{ mm}$, R_{yy} y k también presentan valores superiores al experimento en aproximadamente $1 \text{ m}^2/\text{s}^2$ y $2 \text{ m}^2/\text{s}^2$, respectivamente. La Figura 20 también muestra los tensores de Reynolds y la energía cinética turbulenta k , pero esta vez en diferentes posiciones axiales. En esta figura, es observado que los perfiles R_{yy} , R_{xx} y k en diferentes posiciones axiales concuerdan relativamente bien con el experimento, especialmente para posiciones axiales aguas arriba de $y = 50 \text{ mm}$. La estructura de doble pico que caracteriza estas propiedades del flujo turbulento en cada posición axial es capturada relativamente bien. Obsérvese que el pico interior

corresponde a la capa de cizallamiento interior, mientras que el pico exterior corresponde a la de cizallamiento exterior. Debido a la ruptura del *jet* dentro de la región del vórtice interior, la capa de cizallamiento interior experimenta una mayor producción de turbulencia y, por lo tanto, un mayor nivel de fluctuaciones que la exterior. Así, en $y = 30 \text{ mm}$, R_{yy} alcanza $8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ en la capa interior mientras que en la exterior un valor de $2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ es obtenida. Para todas las posiciones axiales, las tendencias de k están de acuerdo con el experimento. Sin embargo, dentro de la zona de recirculación, k es calculada con exceso en el pico exterior y con defecto en el pico interior. Aguas abajo, en $y = 70 \text{ mm}$, k es calculada en exceso. En cuanto a la componente del tensor de Reynolds R_{xy} , la Figura 7b muestra que tanto la forma como los valores máximos de los perfiles radiales que caracterizan esta componente del tensor están bien capturados. Los valores máximos de R_{xy} son producidos, efectivamente, a lo largo de los límites entre el *jet* de combustible y el vórtice interior del flujo.

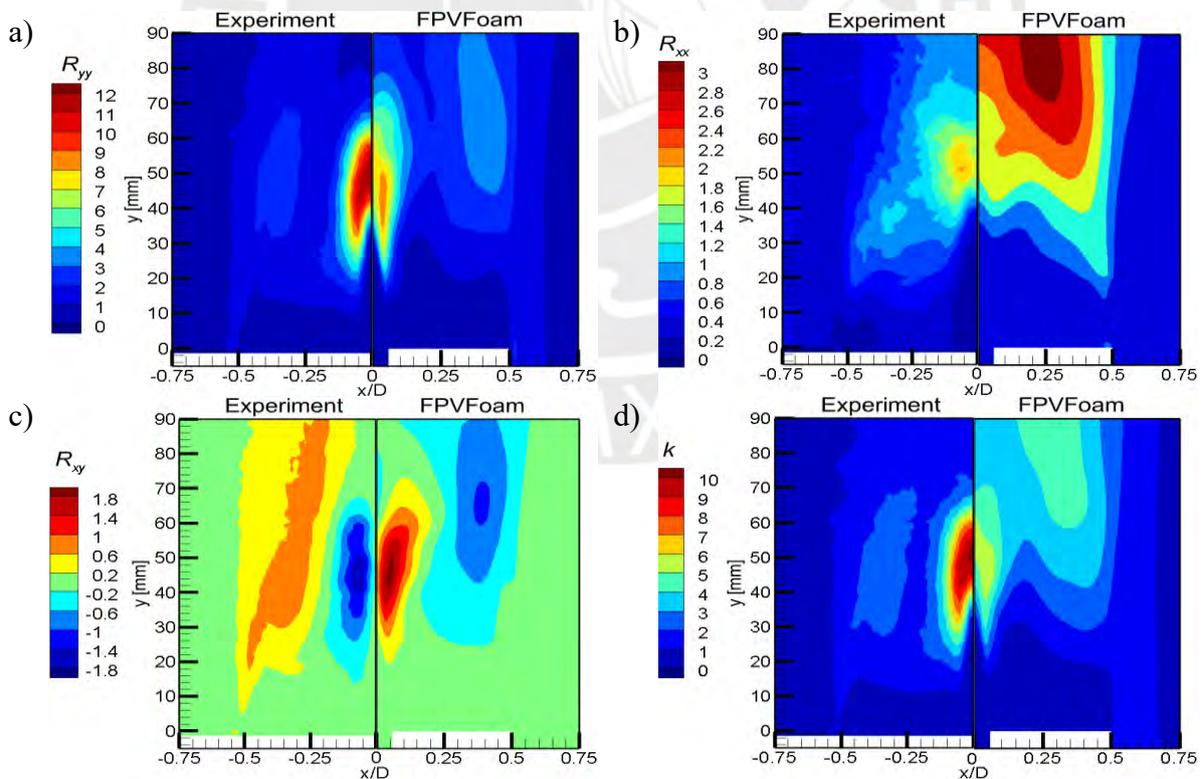


Figura 19. Contornos de a) R_{yy} , b) R_{xx} , c) R_{xy} y d) k (m^2/s^2).

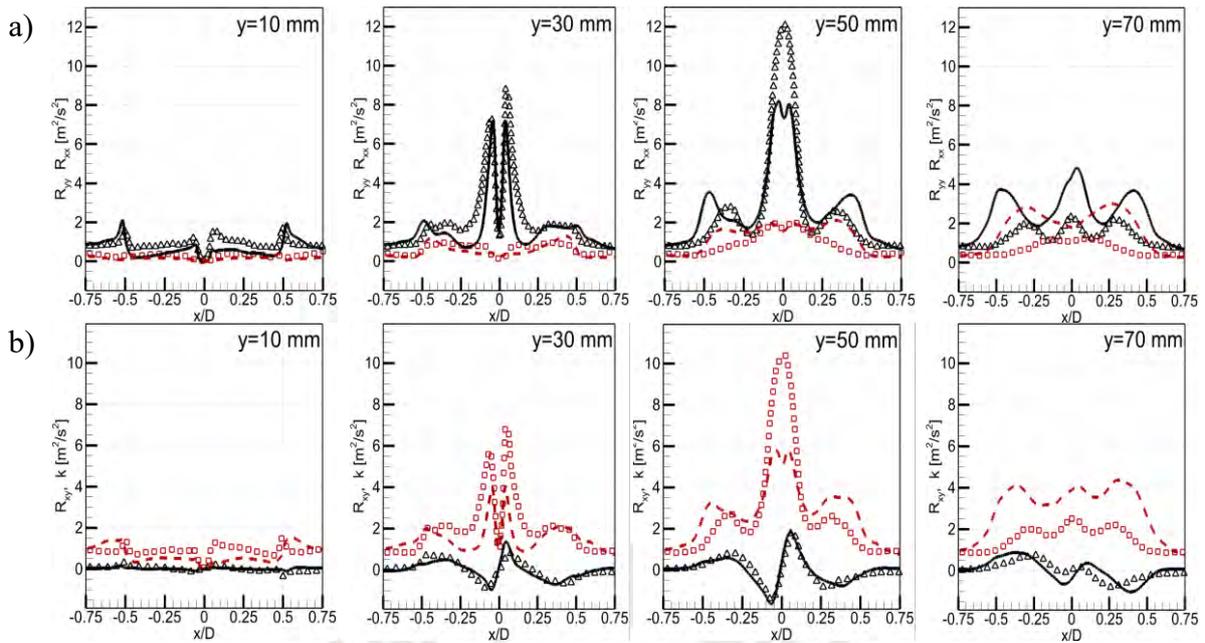


Figura 20. Comparación de a) R_{yy} y b) R_{xy} calculados (líneas sólidas) con el experimento (símbolos Δ), y a) R_{xx} y b) k (líneas discontinuas) con el experimento (símbolos \square) en diferentes posiciones axiales.

3.2.4. Distribución y perfiles OH

La Figura 21 muestra el radical hidroxilo OH instantáneo. En esta figura, una falta de concordancia cualitativa entre los resultados numéricos y los experimentales es mostrada. De hecho, las discrepancias entre los resultados numéricos y los experimentales son evidentes. Por ejemplo, en los resultados numéricos, la llama está atada a la superficie del quemador, mientras que en el experimento la llama está levantada del quemador *lift-off* y, por lo tanto, una región de premezcla parcial es formada aguas arriba del borde de la llama. Además, las extinciones locales de la llama tampoco son descritas correctamente. Para profundizar en el análisis, la Figura 22a muestra una comparación de los contornos medios de OH superpuestos por las líneas de corriente correspondientes. Nótese que aquí los campos de OH han sido normalizados por sus valores máximos. Esta figura muestra que la estructura de doble vórtice que caracteriza a la llama está bien calculada. Sin embargo, los campos medios de OH subrayan las discrepancias significativas entre los datos calculados y los medidos. Por ejemplo, la región de

máximo OH es obtenida cerca de la cara del quemador, mientras que el experimento indica que esta región está ubicada aguas abajo de la zona de recirculación [Figura 22a]. En otras palabras, en las simulaciones numéricas la llama está atada al quemador, lo que no ocurre en el experimento asociado. Por último, la Figura 22b muestra los perfiles radiales del OH normalizado en diferentes posiciones axiales. En concreto, en $y = 10 \text{ mm}$, en comparación con los resultados experimentales en donde no hay presencia de OH, la fracción de masa de OH calculada presenta valores relativamente altos. Para todas las posiciones axiales aguas abajo de $y = 20 \text{ mm}$, las tendencias son de alguna forma similares. Sin embargo, hay algunas discrepancias en los valores máximos de OH. El pico máximo de OH es mayor en $y = 30 \text{ mm}$ y es menor aguas abajo, tanto en $y = 50 \text{ mm}$ como en $y = 70 \text{ mm}$. Estas discrepancias están relacionadas con el hecho de que la zona de máximo OH no está aguas abajo de la zona de recirculación como si ocurre en el experimento utilizado como referencia aquí. Debido a la naturaleza de una llama elevada *lift-off* en este estudio de la combustión, la predicción del OH es especialmente desafiante.

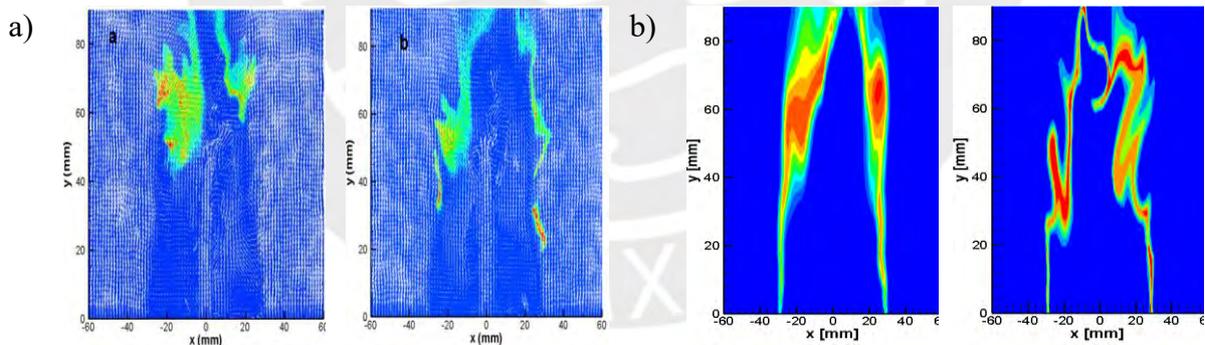


Figura 21. Comparación cualitativa de los campos instantáneos del radical OH. a) Datos experimentales de PLIF-OH, b) fracciones de masa calculadas.

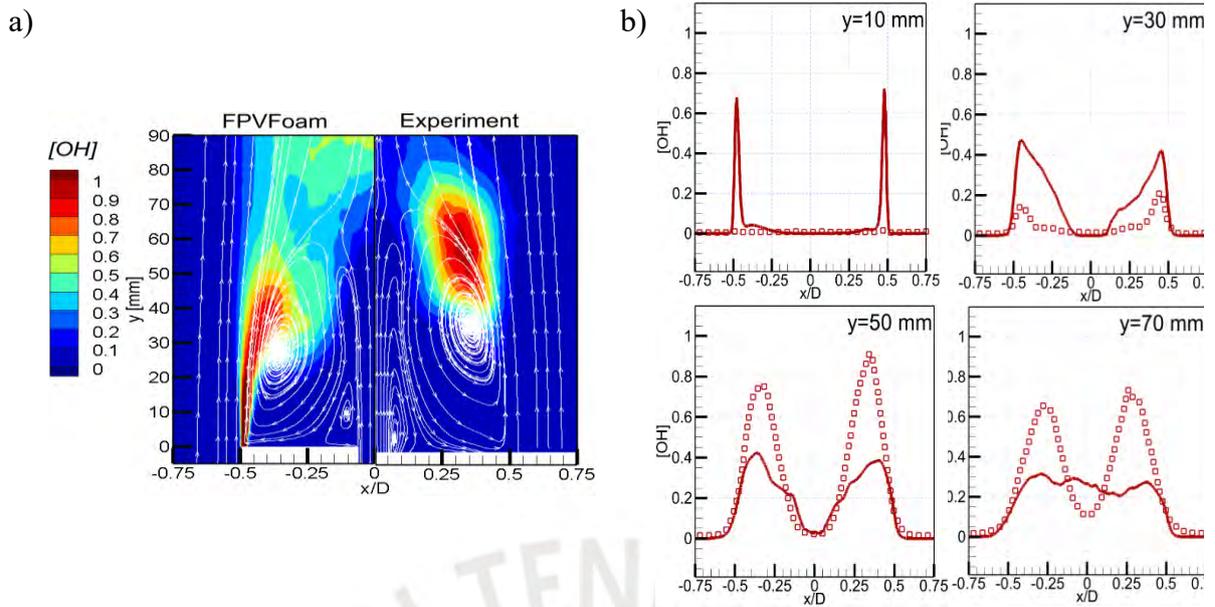


Figura 22. a) Comparación de los contornos de OH normalizados y las líneas de corriente.
 b) Comparación entre los valores predichos de OH normalizados (líneas sólidas) y los datos experimentales de PLIF-OH (símbolos \square) en diferentes posiciones axiales.

Conclusiones

En este trabajo, dos modelos de combustión, EDC-RANS y FPV-LES, fueron evaluados cualitativa y cuantitativamente utilizando datos experimentales previamente medidos de llamas no premezcladas turbulentas estabilizadas en configuraciones de quemadores circulares tipo *bluff-body*. Todas las simulaciones numéricas fueron realizadas en OpenFOAM. El mecanismo cinético químico GRI-Mech 3.0 fue utilizado para describir la combustión en fase gaseosa del combustible (metano). En las simulaciones con el EDC-RANS, el modelo de turbulencia k - ω capturó de forma limitada la capa límite en los ductos de ingreso del combustible y aire a la zona de combustión obteniendo condiciones de contorno no tan cercanas al experimento, donde la velocidad axial de ingreso del jet de combustible obtenida, 8.5 m/s , fue 5.5% menor que la del experimento, 9 m/s . En las FPV-LES, los *flamelets* fueron generados utilizando el código computacional FlameMaster. Para describir adecuadamente las curvas de solución de los *flamelets*, un número de puntos igual a 160 fue utilizado obteniendo un valor máximo en la relación de cambio de pendiente y curvatura de 0.2 y 0.3, respectivamente. Además, el número de *flamelets* (181) utilizado aquí fue definido de manera que la diferencia entre 2 valores consecutivos para cada escalar termoquímico analizado es inferior a 2% .

En las simulaciones numéricas realizadas con el modelo EDC-RANS, los resultados obtenidos de velocidad presentaron discrepancias respecto al experimento, donde la penetración del jet del combustible fue 42% menor y la ubicación del vórtice interior, el cual está comprendido entre el jet del combustible y el vórtice exterior, fue calculada 18 mm aguas abajo. Asimismo, la energía cinética turbulenta y los tensores de Reynolds presentaron valores numéricos superiores de hasta 4 veces mayor que el experimental. Debido a que, en el eje axial $x/D = 0$, la posición del punto de estancamiento $U_y = 0$ obtenida fue aguas arriba respecto al experimento, la posición de los valores máximos de la energía cinética turbulenta y los tensores normales obtenidos presentaron el mismo comportamiento. La especie química OH, aguas

abajo de $y = 40 \text{ mm}$, capturó en un 40% los valores experimentales en la zona de recirculación. De acuerdo a la formulación del modelo EDC, la combustión ocurre en las zonas de turbulencia de escalas pequeñas, por lo tanto, una adecuada descripción de estas es requerida para obtener resultados válidos de combustión. En el presente trabajo, en las simulaciones EDC-RANS, el modelo de turbulencia k-omega presentó limitaciones en la descripción de la energía cinética turbulenta y los tensores de Reynolds. Como consecuencia, discrepancias en las predicciones del radical OH fueron observadas. Además, debido a la cinética química lenta en la formación de OH, esta especie química es difícil de predecir en flujos turbulentos reactivos.

En las simulaciones FPV-LES, respecto a las componentes de la velocidad, los resultados numéricos coincidieron con los experimentales en un 85%; así la ubicación del punto de estancamiento fue calculada 10 mm hacia aguas abajo. Tanto la estructura de doble vórtice como la longitud de la zona de recirculación fueron capturadas. Además, las tensiones de Reynolds y las predicciones de energía cinética turbulenta coincidieron con el experimento en un 66%. Sin embargo, ciertas discrepancias fueron observadas aguas abajo de $y = 10 \text{ mm}$, donde la componente radial del tensor de Reynolds R_{xx} obtenida fue 3 veces mayor. Los valores normalizados del radical OH coincidieron en un 50% con respecto a los asociados al experimento. Las discrepancias entre los resultados numéricos y los experimentales fueron evidentes; por ejemplo, en los resultados numéricos, la llama está atada a la superficie del quemador, mientras que en el experimento está levantada del quemador *lift-off*. Asimismo, las extinciones locales de la llama no fueron capturadas. Los resultados obtenidos fueron, en efecto, incapaces de capturar la naturaleza *lifted* de la llama estudiada experimentalmente. Este tipo de llamas suponen, de hecho, un importante reto en el modelamiento numérico.

Bibliografia

- [1] Bourdrel, T., Bind, M. A., Béjot, Y., Morel, O., Argacha, J.F. (2017). Cardiovascular effects of air pollution. *Archives of Cardiovascular Diseases*, 110(11), 634-642. doi: 10.1016/j.acvd.2017.05.003
- [2] Caetano, N. R. & Figueira da Silva, L. F. (2015). A Comparative Experimental Study of Turbulent Non Premixed Flames Stabilized by a Bluff-Body Burner. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 63, 20–33. doi: 10.1016/j.expthermflusci.2015.01.006
- [3] Ciottoli, P. P., Lee, B. J., Lapenna, P. E., Malpica Galassi, R., Hernandez Perez, F., Martelli, E., Valorani, M., Im, H. G. (2019). Large Eddy Simulation on the Effects of Pressure on Syngas/Air Turbulent Nonpremixed Jet Flames. *Combustion Science and Technology*, 192(10), 1963–1996. doi:10.1080/00102202.2019.1632300
- [4] Echekki, T. & Mastorakos, E. (2010). *Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and Perspectives*. Springer Netherlands.
- [5] Frei, W. (2017). *Which Turbulence Model Should I Choose for My CFD Application?* Recuperado de <https://www.comsol.com>
- [6] Gran, I. R. & Magnussen, B. F. (1996). A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 2. Influence of Combustion Modeling And Finite-Rate Chemistry. *Combustion Science and Technology*, 119 (1-6), 191-217.
- [7] Ihme, M., Cha, C.M. & Pitsch, H. (2005). Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 (1), 793–800.
- [8] Ihme, M. & See, Y.C. (2010). Prediction of autoignition in a lifted methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model. *Combustion and Flame*, 157 (10), 1850–

1862.

- [9] Jain, A. & Xuan, Y. (2019). Effects of large aromatic precursors on soot formation in turbulent non-premixed sooting jet flames. *Combustion Theory and Modelling*, 23(3), 439-466. doi: 10.1080/13647830.2018.1549751
- [10] Jesch, D. (2016). *Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion: A Novel Multivariate Probability Density Function Approach*.
- [11] Lysenko, D. A., Ertesvåg, I. S., Rian, K. E. (2014). Numerical Simulation of Non-premixed Turbulent Combustion Using the Eddy Dissipation Concept and Comparing with the Steady Laminar Flamelet Model. *Flow, Turbulence and Combustion*, 4.
- [12] Magnussen, B. F. (1981). On the Structure of Turbulent and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow. *19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting*.
- [13] Magnussen, B. F. (2005). The Eddy Dissipation Concept: A Bridge Between Science and Technology. *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion*, 1–25.
- [14] Menter, F. R., Kuntz, M. and Langtry, R. (2003). Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model. *Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer*, Begell House, Redding, CT.
- [15] Michelsen, H. A. (2017). Probing Soot Formation, Chemical and Physical Evolution, and Oxidation: A Review of in Situ Diagnostic Techniques and Needs. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (1), 717-735. doi: 10.1016/j.proci.2016.08.027
- [16] MINEM (2014). *PLAN ENERGÉTICO NACIONAL 2014-2025*. Recuperado de <https://www.minem.gob.pe/minem/archivos/file/institucional/publicaciones/InformePlanEnerg%C3%ADa2025-%20281114.pdf>

- [17] Moghadam, R. & Javadi, K. & Kiani, F. (2016). Assessment of the LES-WALE and Zonal-DES Turbulence Models in Simulation of the Flow Structures around the Finite Circular Cylinder. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, 9, 909-923.
- [18] Muller, H., Ferraro, F. & Pfitzner1, M. (2013). *Implementation of a Steady Laminar Flamelet Model for non-premixed combustion in LES and RANS simulations.*
- [19] Myhrvold, T., Ertesvåg*, I. S., Gran, I. R., Cabra, R., Chen, J. Y. (2006). A NUMERICAL INVESTIGATION OF A LIFTED H₂/N₂ TURBULENT JET FLAME IN A VITIATED COFLOW. *Combustion Science and Technology*, 178 (6), 1001-1030.
- [20] Nicoud, F. & Ducros, F. (1999). Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow Turbulence and Combustion*, 62 (3), 183–200. doi: 10.1023/A:1009995426001
- [21] OpenCFD. *OpenFOAM - Official home of The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox.* Disponible en: <https://www.openfoam.com/>.
- [22] Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10 (3), 319-339. doi: 10.1016/0360-1285(84)90114-X
- [23] Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion.* Cambridge University Press.
- [24] Pierce, C. D. (2001). *Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion.*
- [25] Pierce, C., & Moin, P. (2004). Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504, 73-97. doi:10.1017/S0022112004008213
- [26] Pitsch, H. (1998). *FlameMaster, A C++ Computer Program for 0D Combustion and 1D*

Laminar Flame Calculations. Recuperado de <http://www.itv.rwthachen.de/en/downloads/flamemaster/>.

- [27] Pitsch, H. (2006). Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 38 (1), 453–482. doi: 10.1146/annurev.fluid.38.050304.092133.
- [28] Poinso, T., & Veynante, D. (2012). *Theoretical and Numerical Combustion*. (3ra. Edición). R.T. Edwards, Inc.
- [29] 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.
- [30] Pope, S. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [31] Smith, G., Golden, D., Frenklach, M., Moriarty, N., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C., Hanson, R., Song, S., Gardiner, W., Lissianski, V., Qin, Z. *Gri – mechanism 3.0*. Website. <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>.
- [32] Shiehnejadhesar, A., Mehrabian, R., Scharler, R., Goldin, G. M., Obernberger, I. (2014). Development of a gas phase combustion model suitable for low and high turbulence conditions. *Fuel*, 126, 177-187. doi: 10.1016/j.fuel.2014.02.040
- [33] U.S. Energy Information Administration (2017). *International Energy Outlook 2017*. Recuperado de [https://www.eia.gov/outlooks/ieo/pdf/0484\(2017\).pdf](https://www.eia.gov/outlooks/ieo/pdf/0484(2017).pdf)
- [34] 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 (219). doi: 10.1007/s40430-021-02876-y
- [35] Versteeg, H.K. & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid*

Dynamics: The Finite Volume Method. (2da. Edición). Pearson Education Limited.

- [36] Wilcox, D. C. (2008). Formulation of the $k-\omega$ Turbulence Model Revisited. *AIAA Journal*, 46 (11), 2823–2838. doi: 10.2514/3.10041



Apéndices

Apéndice 1: Lista de publicaciones

1. 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 (219). doi: 10.1007/s40430-021-02876-y
2. 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 International Congress of Mechanical Engineering*, Nov 2021, Florianopolis, Brazil. doi: 10.26678/ABCM.COBEM2021.COB2021-0080
3. Manrique, E. (2021). *Modelamiento numérico de flujo reactivo turbulento en un quemador tipo bluff-body usando el modelo de combustión EDC* [Trabajo de investigación para obtener el grado académico de bachiller, PUCP]. Repositorio institucional de la PUCP: <http://hdl.handle.net/20.500.12404/18217>