

# Modelado tridimensional de la combustión de gases con turbulencia Large Eddy Simulation

(Recibido: 06/05/2016; Aceptado: 01/10/2016)

Nicolás Pérez, F.<sup>1</sup>; García Cascales, J.R.<sup>1</sup>; Serna, J.<sup>2</sup>; López Belchí, A.<sup>2</sup>; Velasco, F.J.S.<sup>2</sup>; Otón-Martínez, R.A.<sup>3</sup>; Rey, F.<sup>3</sup>; Laso A.<sup>3</sup>; Ramón Mur<sup>3</sup>; Domingo Moratilla<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Politécnica de Cartagena, Cartagena, España, 30202

<sup>2</sup> Centro Universitario de la Defensa. C/Coronel López Peña, San Javier, España, 30720

<sup>3</sup> EXPAL SYSTEMS, S.A. Avenida del Partenón, 16. 28042 Madrid. España

Teléfono: +34666065681

Email: francisco.nperez@upct.es

**Resumen.** La mecánica de fluidos computacional permite la resolución numérica de problemas cada vez más complejos. En el presente trabajo se presenta un ejemplo de aplicación de esta técnica mediante el modelado de una cámara de combustión de gases en el que se incluye turbulencia "Large Eddy Simulation" y modelo de radiación "Finite Volume Discrete Ordinates Model" (fvDOM) mediante la herramienta de código abierto OpenFOAM.

**Abstract.** Computational Fluid Dynamics achieves numerical resolutions of more and more complex problems. In this work it is presented an application of this branch, which consists of modelling a gas combustion chamber including "Large Eddy Simulation" and "Finite Volume Discrete Ordinates Model" (fvDOM) as turbulence and radiation models. For this purpose, the open-source CFD toolbox OpenFOAM has been used.

## 1. Introducción

En el presente trabajo se presenta un ejemplo de aplicación de la mecánica de fluidos computacional mediante el empleo de la herramienta de código abierto OpenFOAM. Para ello, se realizará la descripción del problema resuelto, así como el modelado realizado para su resolución numérica.

El problema consiste en una cámara de combustión, sometida inicialmente a una temperatura constante y a presión atmosférica, estando los gases en el interior afectados por el efecto de la gravedad y sometido a una inyección de metano por una de sus superficies.

## 2. Descripción y modelado del problema

En este apartado se describen los modelos físicos y matemáticos elegidos para el presente estudio, así como la configuración escogida para la simulación del problema.

### 2.1. Descripción del problema

Las ecuaciones consideradas para este estudio son las ecuaciones de Navier-Stokes de flujo compresible:

Continuidad, cantidad de movimiento y energía:

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho (e + \frac{v^2}{2})] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j (e + \frac{v^2}{2}) + p + \quad (3)$$

$$q_j - u_i \tau_{ij}] = 0$$

Donde  $\rho$  es la densidad del gas,  $u_i$  es la componente  $i$  de la velocidad instantánea,  $p$  es la presión total del gas,  $\tau_{ij}$  es el tensor de esfuerzos de Reynolds,  $V$  el módulo de la velocidad y  $q_j$  son los términos fuente de calor, que procederán de la radiación y de la propia energía de combustión.

Se ha elegido el modelo de turbulencia LES Smagorinsky Lilly implementado en OpenFOAM (Olle P. 2011). Los modelos LES son modelos de turbulencia no estacionarios ampliamente utilizados que emplean las "Filtered local volumen-averaged Navier Stokes equations" para resolver directamente las zonas denominadas "large scales", mientras que las llamadas "Kolmogorov scales" o escalas pequeñas son resueltas por medio de lo que se denomina "subgrid-scale model" (Nicoud F., Ducros F. 1999).

Para la combustión se ha escogido el modelo denominado "Infinitely Fast Chemistry". En este modelo, la velocidad de reacción se considera infinitamente rápida, sin tener en cuenta ninguna ley de cinética. Por otro lado, la combustión se considerará turbulenta, lo que mejora la mezcla de especies, aunque si existe demasiada turbulencia, puede producirse extinción local de la combustión. (Dominik Christ. 2001).

Como modelo de radiación se ha escogido el denominado "Finite volume Discrete Ordinates Model", el cuál calcula la transferencia de calor radiativa mediante ángulos sólidos discretos. Es uno de los modelos con mejor relación coste computacional/precisión, además de que permite medios semitransparentes, superficies espejo, transmisión dependiente de la longitud de onda, etc.

## 2.2. Configuración de la simulación

En primer lugar, se ha realizado el mallado del dominio, resultando una malla con 262,500 elementos hexaédricos, con los un valor de “skewness” máximo de 1.397 y de relación de aspecto de 3.156.

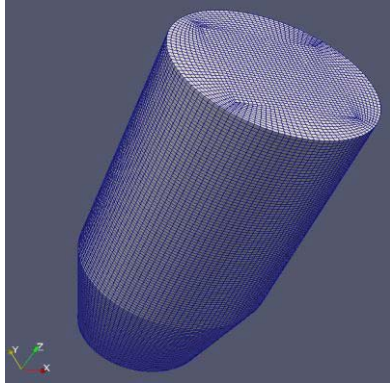


Fig. 7. Dominio mallado del problema.

Las condiciones iniciales y de contorno son las siguientes:

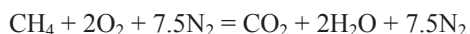
**Outlet:** Cara superior del dominio, modelada como salida libre conectada a presión ambiente  $N_2$  0.76699  $O_2$  0.23301 e inicialmente a 300K y velocidad nula en el instante inicial.

**Sides:** Paredes laterales, inicialmente a 300K, gradiente normal de presión nulo y velocidad fijada a valor nulo. Valores de  $O_2$  y  $N_2$  iniciales igual al del resto del valor inicial del interior del dominio.

**Base:** Parte restante de la cara inferior. Modelada como paredes, al igual que las superficies “sides”.

**Inlet:** Zona por donde se inyecta  $CH_4$ , de 0.11x0.11m situada en el centro de la superficie interior o base. La concentración de esta especie se fija a la unidad durante toda la simulación, siendo por consiguiente la del resto de especies nula. La velocidad de inyección es constante y normal a la superficie, con un valor de 0.01m/s. La temperatura a la que se inyecta el metano es de 300K.

Configuración del “solver” elegido: *fireFoam*, diseñado para simulación de fuegos y difusión turbulenta de llamas de forma transitoria. Permite la inclusión de las reacciones químicas que se deseen, modelos de radiación, etc. En el mismo se ha configurado el modelo de combustión *infinatelyFastChemistry* explícita. La reacción de combustión es la siguiente:



Por lo tanto, se han de definir 5 especies  $CH_4$   $O_2$   $N_2$   $CO_2$   $H_2O$ , todas ellas en fase gaseosa.

Se han definido valores de calor específico ( $C_p$ ) variable en forma de polinomio de Janaf para cada una de las especies, junto con su ecuación de gas perfecto para las mismas. Se han introducido los coeficientes de los polinomios de Janaf para altas temperaturas y otros para bajas temperaturas para cada una de las distintas especies, así como del coeficiente de Sutherland  $A_S$  ( $1.67212e-6$  para todas las especies) y la temperatura de Sutherland  $T_S$  (170.672 para todas las especies). También es necesario especificar el peso molecular de cada una de las especies.

Coficiente estequiométrico aire-combustible: 17.085

Coficiente estequiométrico oxígeno-combustible: 3.989

Para el modelado de la radiación fvDOM, se han definido los siguientes parámetros:

- $N_\phi = 2$  ( $\pi/2$  ángulos azimutales sobre X-Y, de Y a X)
- $N_\theta = 2$  ( $\pi$  ángulos polares, desde eje Z al plano X-Y)
- Absorción  $0.01 [m^{-1}]$
- Emisividad  $0.01 [m^{-1}]$
- $E = 0 [kg * m^{-1} s^{-3}]$

Para la absorción y emisión de radiación de cada una de las especies presentes, se han definido los siguientes expresiones:

- $CO_2$

0 si  $T < 200K$

$$18.74 - 121.31e3 * T^{-1} + 273.5e6 * T^{-2} - 194.05e9 * T^{-3} + 56.31e12 * T^{-4} - 5.8169e15 * T^{-5} \text{ si } T > 200K$$

- $H_2O$

0 si  $T < 200K$

$$-0.23093 - 1.12390e3 * T^{-1} + 9.4153e6 * T^{-2} - 2.99885e9 * T^{-3} + 0.51382e12 * T^{-4} - 1.868e10 * T^{-5} \text{ si } T > 200K$$

- $CH_4$

0 si  $T < 200K$

$$6.6334 - 0.0035686 * T + 1.6682e-8 * T^2 + 2.5611e-10 * T^3 - 2.6558e-14 * T^4 \text{ si } T > 200K$$

- $O_2$  y  $N_2$

0 si  $T < 200K$

0.1 si  $T > 200K$

Tiempo total simulado: 3.5s con tiempo de paso de 0.001 s.

### 3. Resultados y conclusiones

En las siguientes imágenes se representan los resultados en un plano intermedio de la cámara de combustión de las principales variables que definen el problema en el instante final de la simulación:

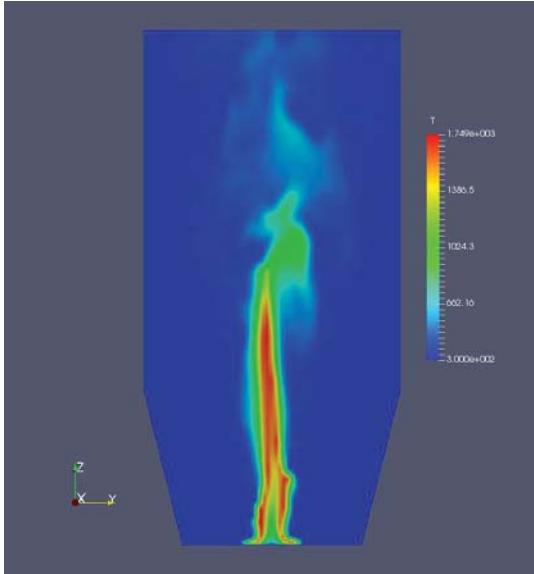


Fig. 8. Campo de temperatura en 3.5s de simulación.

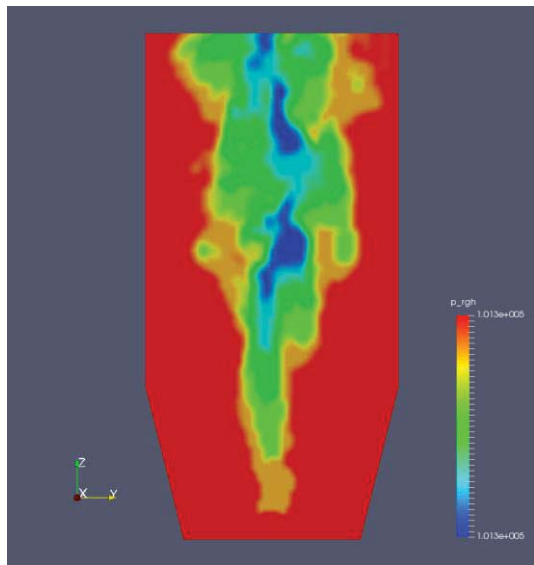


Fig. 9. Campo de presiones en 3.5s de simulación.

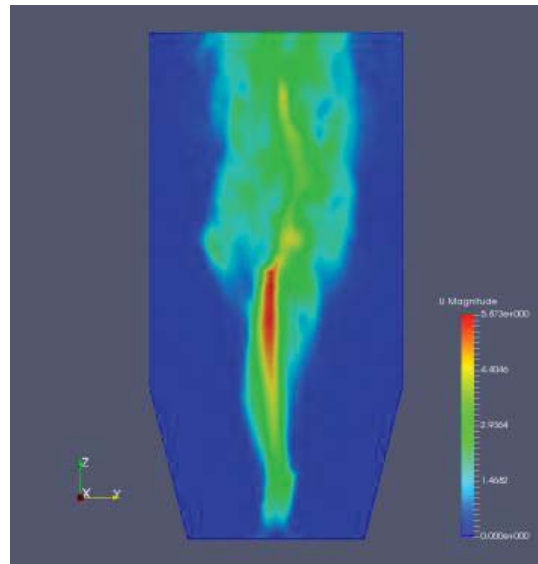


Fig. 10. Campo de velocidades en 3.5s de simulación.

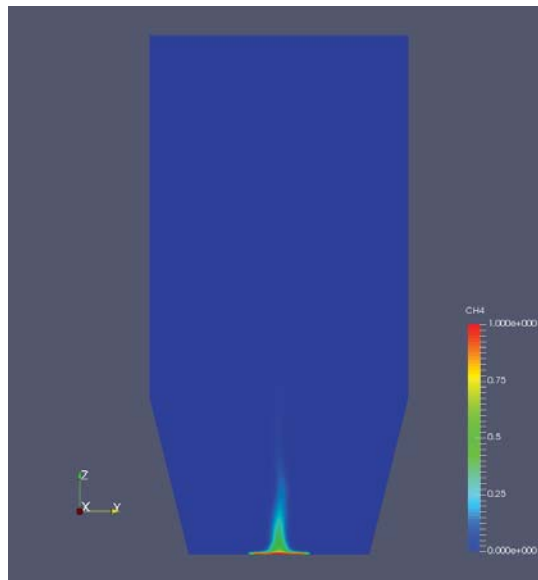


Fig. 11. Fracción molar de CH<sub>4</sub> en 3.5s de simulación.

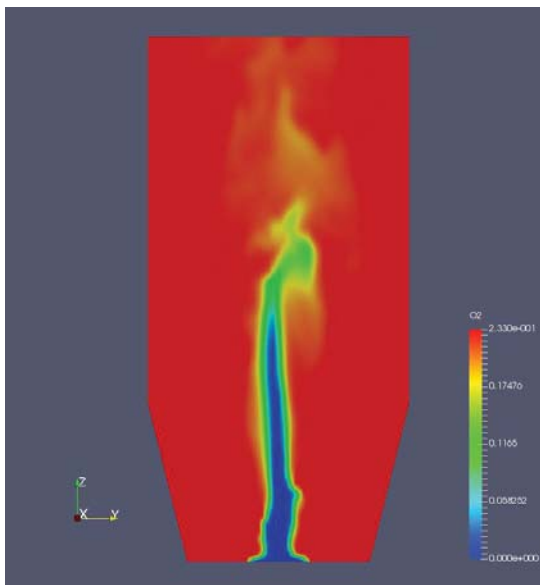
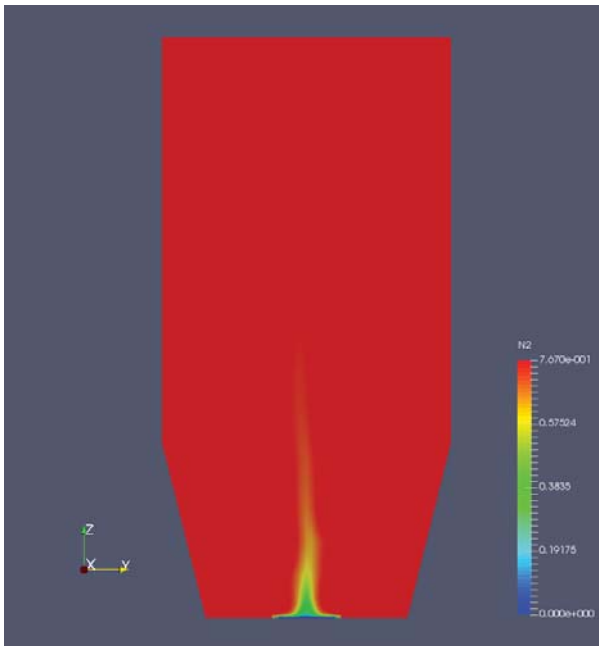
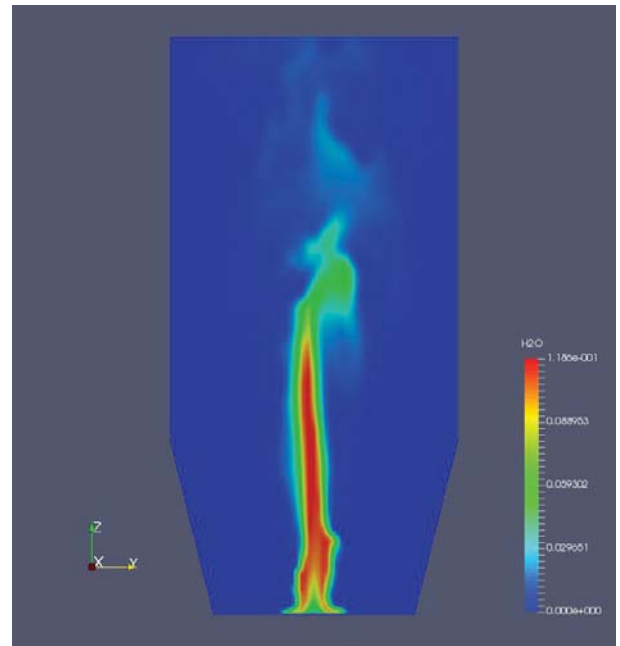
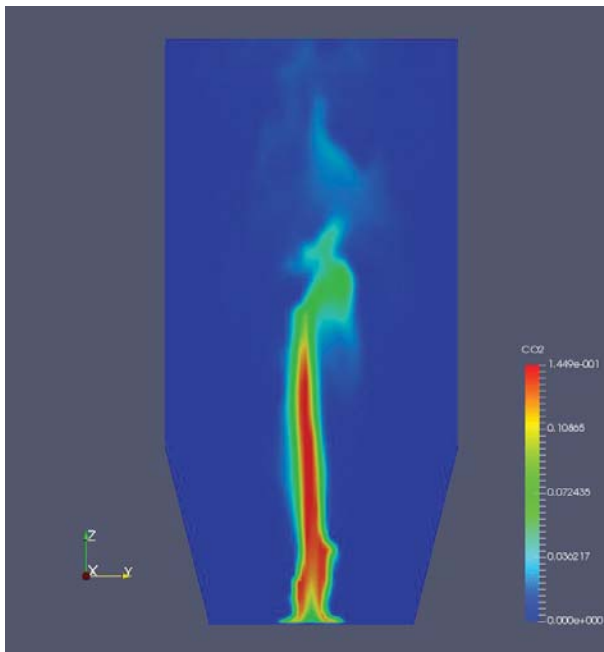


Fig. 12. Fracción molar de O<sub>2</sub> en 3.5s de simulación.

Fig. 13. Fracción másica de  $N_2$  en 3.5s de simulación.Fig. 15. Fracción másica de  $H_2O$  en 3.5s de simulación.Fig. 14. Fracción másica de  $CO_2$  en 3.5s de simulación.

## Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado a través del Proyecto de Investigación “MODELIZACIÓN DE GENERACIÓN DE GASES PARA LA REDUCCIÓN DE LA RESISTENCIA AERODINÁMICA” (Ref. IDI-20151011) financiado por el CDTI del Ministerio de Economía y Competitividad y Fondos FEDER.

## Referencias

- [1] Olle P. (2011) “A pimpleFoam tutorial for channel flow, with respect to different LES models” Chalmers University of Technology.
- [2] Nicoud F., Ducros F. (1999) “Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor”. Flow, Turbulence and Combustion. Volume 62, Issue 3, pp 183-200.
- [3] Dominik Christ. (2001) “Simulating the combustion of gaseous fuels”. 6<sup>th</sup> OpenFoam Workshop Training Session.