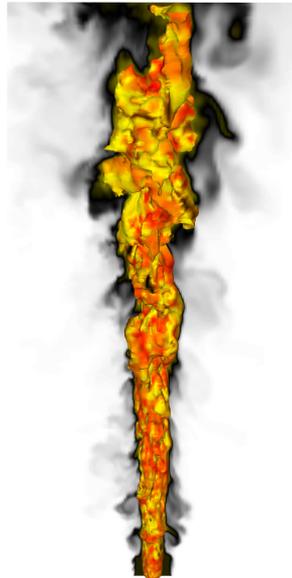




Tesis Doctoral

Modelización de la combustión de llamas turbulentas mediante la Simulación de las Grandes Escalas



Por José Salvador Ochoa Torres

Director de tesis:
Dr. Norberto Fueyo Díaz

Área de Mecánica de Fluidos
Departamento de Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos
Centro Politécnico Superior
Universidad de Zaragoza
Diciembre, 2009

Modelización de la combustión de llamas turbulentas mediante la Simulación de las Grandes Escala

Tesis doctoral presentada en la Universidad de Zaragoza para la
obtención del grado de Doctor

por

José Salvador Ochoa Torres

Zaragoza, Diciembre de 2009

A Nidia y Andrea
A mi padre, *In Memoriam*

Quiero expresar mi agradecimiento a cuantas personas han hecho posible la realización de este trabajo. Aun a riesgo de olvidarme de alguien, me gustaría destacar las siguientes:

A mi director de Tesis, Dr. Norberto Fueyo, por la amistad que en todo momento nos brindó, tanto a mi como a mi familia. Sin su apoyo, guía y valiosos consejos no habría sido posible la culminación de este trabajo.

A los compañeros, amigos y personal del Área de Mecánica de Fluidos que en diversos momentos me ayudaron y motivaron: Dr. Cesar Dopazo, Luis Manuel Cerecedo, Ramón Chordá, Moussa Maikaka, Enrique López, Mohamed Hamdy, Daniel Fuster, Alberto Serrano, Antonio Gómez, Carlos Montañés, Ana Cubero, Salvador Izquierdo, María García, Alberto Sánchez, Javier Briz, Olga Cebolla, Pilar Ezquerra, Javier Blasco, Germán Ferreira.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, México) por la beca concedida durante los primeros años de mi doctorado.

A mi madre y hermanos, por su apoyo y ánimos.

Por último, pero no por ello menos importante, a Nidia y a Andrea. A ellas dedico esta Tesis y mi vida.

Resumen

En esta tesis se estudia la estructura submalla de la tasa de disipación y campos de escalares en flujos turbulentos y reactivos empleando *Linear Eddy Model (LEM)* como modelo submalla en Simulaciones de las Grandes Escalas (*LES*). *LEM* es un técnica que captura de todas las escalas del del flujo mediante una discretización unidimensional, por lo que se evitan las hipótesis sobre la interacción entre la química y la turbulencia. Las llamas experimentales analizadas son sistemas no premezclados y estabilizados con una corriente piloto (configuraciones C, D y E de los laboratorios Sandia).

El proceso de combustión y sus interacciones con la turbulencia se ha modelado con dos estrategias diferentes. Por un lado, con un modelo de flamelets y funciones de densidad de probabilidad de forma supuesta y, por otro, usando *Linear Eddy Model* para modelar el transporte y determinación de las propiedades submalla tanto de escalares pasivos como reactivos. En esta última técnica, denominada *S-LEM (Subgrid-LEM)* en esta investigación, todos los procesos físicos que ocurren por debajo de la resolución de la malla, tales como la difusión molecular, la convección turbulenta y las reacciones químicas, son modeladas en un dominio unidimensional inmerso en cada una de las celdas de la malla. El dominio submalla es discretizado para resolver todo el rango de escalas entre el tamaño característico de la celda (escala de filtrado en *LES*) y la escala más pequeña del flujo (escala de Kolmogorov). Los procesos son modelados de acuerdo al procedimiento original del modelo *LEM* de Kerstein, con una ecuación unidimensional transitoria de difusión-reacción e incorporando el efecto de la convección tridimensional (torbellinos turbulentos al nivel submalla) mediante procesos estocásticos de *triplet map*. Las escalas más grandes del flujo son explícitamente capturadas por la malla y las ecuaciones de *LES*. El transporte de las grandes escalas sobre los dominios submalla se modela mediante una técnica denominada *splicing* que intercambia porciones de los subdominios de acuerdo al gasto másico entre celdas contiguas y a la intensidad local de las fluctuaciones turbulentas determinadas a partir de la energía cinética turbulenta submalla. El algoritmo de *splicing* desarrollado para esta tesis incorpora contribuciones de alto orden en el modelado de la convección a través de una analogía con los esquemas similares en el método de volúmenes finitos.

El documento refleja el estado del arte de *LES* y de las principales estrategias para el modelado de los flujos turbulentos reactivos. El comportamiento de los algoritmos numéricos mas relevantes, así como los requisitos de resolución de la malla de discretización y del dominio submalla, se evalúan previamente a las simulaciones principales. Las predicciones pueden clasificarse en dos tipos:

- i.* Simulaciones *LES* con flamelets y *S-LEM* para la evolución de un escalar no reactivo.
- ii.* Simulaciones *LES* con *S-LEM* reactivo.

En el primer caso, la evolución de un escalar en *S-LEM* se valida comparando el transporte de la fracción de mezcla y sus propiedades submalla con las correspondientes magnitudes en *LES* y flamelets. En el segundo, la cinética química es introducida en *S-LEM* mediante un mecanismo de

un paso. La evolución de los escalares y procesos submalla asociados con la reacción de combustión y la termoquímica del flujo es acoplada junto al proceso de solución de las ecuaciones en *LES*.

La información extraída de los subdominios unidimensionales es usada para analizar la estructura submalla de los escalares, principalmente de la tasa de disipación, para la que existen medidas experimentales en distintas posiciones de las llamas analizadas, y para evaluar las interacciones entre la cinética química y la turbulencia capturadas por *S-LEM*.

La comparación de las predicciones con los datos experimentales, tanto del modelado con flamelets como de *S-LEM* puede considerarse satisfactoria. Asimismo, el modelo *S-LEM* desarrollado reproduce adecuadamente la evolución del flujo y las propiedades submalla de los campos de escalares.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Antecedentes	3
1.2.1. Simulación de las Grandes Escalas	3
1.2.2. Modelado de la combustión turbulenta	4
1.2.3. <i>Linear Eddy Model</i>	6
1.2.4. Configuraciones experimentales analizadas	8
1.3. Objetivos de la Tesis	8
1.4. Estructura de la Tesis	9
2. Dinámica de los flujos reactivos	11
2.1. Parámetros relevantes de un flujo turbulento reactivo	11
2.1.1. Parámetros de la turbulencia	11
2.1.2. Parámetros químicos	12
2.2. Conservación de la masa	12
2.3. Conservación de la cantidad de movimiento	13
2.4. Conservación de las especies químicas	13
2.5. Conservación de la energía	14
2.6. Ecuaciones adicionales	15
2.6.1. Densidad de una mezcla de gases	16
2.6.2. Temperatura	16
2.6.3. Flujo difusivo de especies químicas	16
2.6.4. Flujo difusivo de calor	17
2.7. Ecuación de conservación para la fracción de mezcla	17
2.8. Conclusiones	19
3. Simulación de las Grandes Escalas del campo de velocidad	21
3.1. Requisitos computacionales	21
3.2. <i>LES</i> del campo de velocidad	23
3.3. Operación de Filtrado	24
3.4. Ecuaciones de evolución para las grandes escalas	27
3.5. Estrategias de cierre para las ecuaciones filtradas	28
3.6. Modelado funcional: Modelos de viscosidad turbulenta	29

3.6.1.	El modelo de Smagorinsky	30
3.6.2.	Modelado dinámico	32
3.6.3.	Modelo <i>WALE</i> (<i>Wall-Adapting Local Eddy-viscosity</i>)	35
3.6.4.	Modelo de una ecuación	36
3.7.	Modelado estructural	37
3.8.	Formulaciones espectrales	38
3.9.	Conclusiones	38
4.	Simulación de las Grandes Escalas de flujos turbulentos reactivos	41
4.1.	Ecuaciones filtradas de conservación de las especies químicas	42
4.1.1.	Modelado del término convectivo	42
4.1.2.	Modelado del término de reacción química	43
4.2.	Ecuación filtrada para la entalpía	44
4.3.	Ecuación filtrada para la fracción de mezcla	44
4.4.	Modelos de combustión	45
4.4.1.	Clasificación de los sistemas de combustión	45
4.4.2.	Clasificación de modelos de combustión	46
4.4.3.	Interacción química-turbulencia	47
4.5.	Concepto de flamelet laminar	51
4.6.	Modelo de flamelets en <i>LES</i>	55
4.6.1.	Aplicación del concepto de flamelet laminar al flujo turbulento	55
4.6.2.	Forma supuesta para las funciones de densidad de probabilidad filtradas	56
4.6.3.	Modelado de la varianza y de la tasa de disipación	57
4.7.	<i>Subgrid Linear Eddy Model</i>	59
4.7.1.	Modelado de términos submalla	61
4.7.2.	Modelado de términos de gran escala	64
4.7.3.	Varianza y tasa de disipación en <i>S-LEM</i>	65
4.8.	Representación de la cinética química	65
4.8.1.	Reducción del sistema químico	65
4.8.2.	Técnicas de acoplamiento de la química al cálculo	66
4.8.3.	Mecanismo químico de un paso para la combustión de hidrocarburos	67
4.9.	Conclusiones	68
5.	Método numérico	69
5.1.	Proceso de solución	69
5.2.	Método de volúmenes finitos	70
5.3.	Discretización espacial	73
5.3.1.	Errores por resolución de la malla	74
5.3.2.	Errores de <i>aliasing</i>	75
5.3.3.	Errores en la discretización de los operadores de derivación	75
5.4.	Integración temporal	76
5.5.	Condiciones de contorno e iniciales	76
5.5.1.	Condición de entrada	77

5.5.2.	Condición de salida	78
5.5.3.	Paredes	78
5.5.4.	Condiciones iniciales	79
5.6.	Generación de tablas de flamelet y su acoplamiento en <i>LES</i>	79
5.7.	Integración del modelo <i>S-LEM</i> en <i>LES</i>	81
5.7.1.	Convección de las grandes escalas (<i>splicing</i>)	82
5.7.2.	Procesos submalla: difusión, reacción y <i>triplet map</i>	83
5.7.3.	Discretización submalla	84
5.8.	Evaluación de las predicciones en <i>LES</i>	85
5.9.	Conclusiones	85
6.	Llamas turbulentas pilotadas de difusión: consideraciones preliminares del mo-	
	delado	87
6.1.	Configuración experimental	87
6.2.	Antecedentes	88
6.3.	Dominio y malla computacional	92
6.4.	Modelado en <i>LES</i>	93
6.5.	Condiciones de contorno para la turbulencia	97
6.6.	Dominio de <i>S-LEM</i>	100
6.7.	Transporte de grandes escalas en <i>S-LEM</i>	102
6.8.	Proceso de solución	102
6.9.	Tiempo de cómputo	103
6.10.	Conclusiones	104
7.	Simulación con flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo	107
7.1.	Esquema de las simulaciones	107
7.2.	Campo instantáneo	108
7.3.	Resultados estadísticos del flujo	108
7.3.1.	Velocidades	108
7.3.2.	Escalares	110
7.4.	Conclusiones	113
8.	Simulación con <i>S-LEM</i> reactivo	125
8.1.	Esquema de las simulaciones	125
8.2.	Campo instantáneo	125
8.3.	Resultados estadísticos del flujo	126
8.3.1.	Velocidades	126
8.3.2.	Escalares	128
8.4.	Conclusiones	131
9.	Propiedades del campo submalla	143
9.1.	Simulación con flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo	143
9.1.1.	Varianza y tasa disipación submalla de los campos filtrados.	143
9.1.2.	Distribución submalla de la tasa de disipación	144

9.2. Simulación con flamelets y <i>S-LEM</i> reactivo	146
9.2.1. Distribución submalla de especies químicas	146
9.2.2. Distribución submalla de la tasa de disipación	147
9.2.3. Interacción química-turbulencia	149
9.3. Conclusiones	149
10. Conclusiones generales	159
10.1. Configuraciones y modelos	159
10.2. Simulaciones con flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo	161
10.3. Simulaciones con <i>S-LEM</i> reactivo	162
10.4. Propiedades del campo submalla	162
10.5. Trabajo futuro	164
A. Esquemas de discretización espacial y temporal	165
A.1. Discretización espacial	165
A.1.1. Esquemas lineales	166
A.1.2. Esquemas de alto orden no lineales	168
A.2. Discretización temporal	169
A.2.1. Esquema de alto orden en el tiempo	169
A.2.2. Cálculo del paso temporal (Δt)	169
B. Transporte de términos de gran escala en <i>S-LEM</i>	171
B.1. Influencia de parámetros submalla sobre el <i>splicing</i>	171
B.1.1. Discretización submalla	172
B.1.2. Procesos de mezcla submalla	172
B.2. Orden de precisión en el esquema de transporte en <i>S-LEM</i>	173
B.2.1. Adaptación de esquemas de alto orden a <i>S-LEM</i>	173
B.2.2. Aplicación a un caso práctico	178
B.3. Conclusiones	178
C. Caso test: Flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado	181
C.1. Configuración experimental	181
C.2. Antecedentes	182
C.3. Detalles numéricos	183
C.4. Resultados	185
C.4.1. Simulaciones en dos dimensiones	185
C.4.2. <i>LES</i> en tres dimensiones	195
C.4.3. Comparación de resultados entre <i>LES</i> y <i>RANS</i>	199
C.4.4. Eficiencia de la simulación en paralelo	200
C.5. Conclusiones	201
D. RUN-1DL y subrutinas para la generación de tablas de flamelets	203
D.1. Estructura del programa	203
D.2. Ficheros de entrada	204

D.2.1. Ficheros de química	204
D.2.2. Fichero de continuación	205
D.2.3. Fichero de control	205
D.3. Adaptaciones al programa original	206
E. Mecanismo reducido de Smooke	209
Lista de tablas	211
Lista de figuras	213
Bibliografía	221

Capítulo 1

Introducción

Los combustibles fósiles representan la principal fuente de energía y todo indica que durante los próximos años seguirán teniendo un papel preponderante. La creciente preocupación por el medio ambiente y el uso eficiente de los recursos incentiva el desarrollo de tecnologías eficientes y limpias. En los procesos industriales, es común que la combustión tenga lugar en un flujo turbulento, por lo que comprender los procesos que intervienen en este fenómeno es fundamental en el diseño de los equipos.

Este trabajo de investigación se enmarca en el campo de la Fluidodinámica Computacional (*CFD*, *Computational Fluid Dynamics*), una herramienta que se ha vuelto imprescindible en el proceso de optimización de los equipos industriales. Desde sus orígenes, *CFD* se mantiene en constante evolución, incentivada por el aumento en potencia de los recursos computacionales. Esta tesis analiza, mediante la Simulación de las Grandes Escalas (*LES*, *Large Eddy Simulation*), la combustión en llamas turbulentas no premezcladas.

En este capítulo se expone brevemente el contexto que motiva la investigación del fenómeno, los antecedentes y estado del arte del modelado numérico de la combustión turbulenta, así como una descripción de las configuraciones experimentales analizadas. Finalmente, se definen los objetivos de la tesis y la estructura de la memoria.

1.1. Motivación

Los combustibles fósiles representan la principal fuente de energía para abastecer a los sectores doméstico, industrial y de transporte [1]. A pesar de los incrementos que han sufrido y el reconocimiento de su limitación, se estima que seguirán proporcionando la mayor parte de la energía en los próximos años [14, 165, 172]. Las normativas ambientales son cada vez más restrictivas en cuanto a la emisión de contaminantes producida por la combustión de estos recursos. Además, hay una preocupación creciente sobre el papel del dióxido de carbono (CO_2), inevitable en aprovechamiento de estas fuentes, en el calentamiento global del planeta. Por tanto, el desarrollo de la tecnología para aprovechar estas fuentes tiene entre sus principales retos maximizar la eficiencia de los equipos y reducir la emisión de contaminantes. En el diseño de turbinas de gas, por ejemplo, es

habitual considerar una serie de condiciones de operación que frecuentemente son conflictivas entre sí [100, 278], como el funcionamiento a altas presiones y temperaturas, a la vez que bajas emisiones a la atmósfera, máxima eficiencia y moderados costes de producción y mantenimiento. Alcanzar estos objetivos requiere, entre otras cosas, una predicción precisa de las propiedades físicas y químicas del flujo reactivo en la turbina. En los procesos industriales, la combustión habitualmente tiene lugar en un flujo turbulento. Aunque la experimentación y la experiencia empírica siguen siendo imprescindibles en la actualidad [15], una parte importante del diseño de éstos equipos se obtiene mediante *CFD*, simulando numéricamente y optimizando los procesos del flujo por medio de ordenadores. Esta herramienta ha experimentado una rápida evolución y se ha convertido en un elemento imprescindible tanto en la investigación como en el análisis de los equipos industriales. Esto se ha debido, en parte, al progreso en la velocidad, memoria y capacidad de almacenamiento de los equipos informáticos, a la par de una disminución de sus costes económicos y el desarrollo de algoritmos numéricos que optimizan el uso de los recursos computacionales.

A pesar del rápido desarrollo de los ordenadores y de los métodos numéricos, la captura (o cálculo) de todas las escalas de las estructuras de la turbulencia, técnica conocida como Simulación Numérica Directa (*DNS*, *Direct Numerical Simulation*) excede en la mayoría de los casos de aplicación práctica los recursos computacionales disponibles y no puede, ni podrá en el futuro inmediato, satisfacer las urgentes necesidades de predicción que requiere el diseño de sistemas de combustión industriales [17]. Hasta ahora, estas necesidades han sido satisfechas principalmente con el uso de algoritmos basados en ecuaciones promediadas *RANS* (*Reynolds, or Favre, Averaged Navier-Stokes equations*). Sin embargo, esta técnica resuelve sólo las estructuras medias del movimiento, modelando el efecto de las fluctuaciones turbulentas en todas las escalas del flujo, por que es difícil capturar adecuadamente las inestabilidades que se presentan en la combustión turbulenta, por ejemplo deformaciones transitorias en la estructura de las llamas.

La Simulación de las Grandes Escalas es una técnica intermedia entre *DNS* y *RANS*. A pesar de que surgió en los años 60 como herramienta de investigación en meteorología [236, 132, 50], en la actualidad *LES* es cada vez más determinante en la predicción y estudio de los flujos turbulentos reactivos. Su característica principal, a grandes rasgos, es la captura de las escalas más grandes de la turbulencia del flujo y hasta donde la resolución de la malla (o la imposición de un filtrado) lo permite, modelando los procesos residuales o submalla. Dado que la combustión ocurre al nivel de las escalas más pequeñas del flujo, la cinética química y sus interacciones con la turbulencia tiene que ser modeladas. La mayoría de las estrategias provienen de adaptaciones a modelos ampliamente validados en el contexto de *RANS*, como por ejemplo, el modelado con flamelets [183, 184]. Aunque estos métodos han sido empleados satisfactoriamente en predicciones *LES* de flujos turbulentos reactivos (por ejemplo en [193, 54, 109]), son varios los aspectos que aún no están del todo claros en esta técnica [100], además de que muchas de estas estrategias siguen recurriendo a hipótesis para el modelado de las interacciones entre procesos en las escalas más pequeñas. Un cálculo que evite estas hipótesis y que, por tanto, proporcione una representación más realista del fenómeno requiere de técnicas de modelado más sofisticadas, como los métodos basados en el transporte de la Función de Densidad de Probabilidad Filtrada (*FDP*, *Filtered Density Function*) [40] o el uso de *Linear Eddy Model (LEM)* para modelar los procesos submalla [237]; aunque, por otro lado, exigirán sensiblemente más recursos computacionales [35]. En el contexto que actualmente

plantean estos desafíos se ha desarrollado la investigación de esta tesis.

1.2. Antecedentes

1.2.1. Simulación de las Grandes Escalas

Prácticamente todas las técnicas y modelos para la predicción de flujos turbulentos parten de la hipótesis de la cascada de energía como fundamento teórico [123]. La energía cinética se transfiere permanente de las escalas más grandes del flujo a escalas cada vez más pequeñas hasta un tamaño (escala de Kolmogorov) en el que se disipan por efecto de las fuerzas viscosas [123]. El rango de las escalas de movimiento presentes en un flujo turbulento es altamente dependiente del número de Reynolds [189]. Los métodos clásicos de *CFD* para predecir un flujo turbulento se distinguen entre sí por la cantidad de escalas capturadas, lo que determina también, el enfoque en el modelado (Figura 1.1).

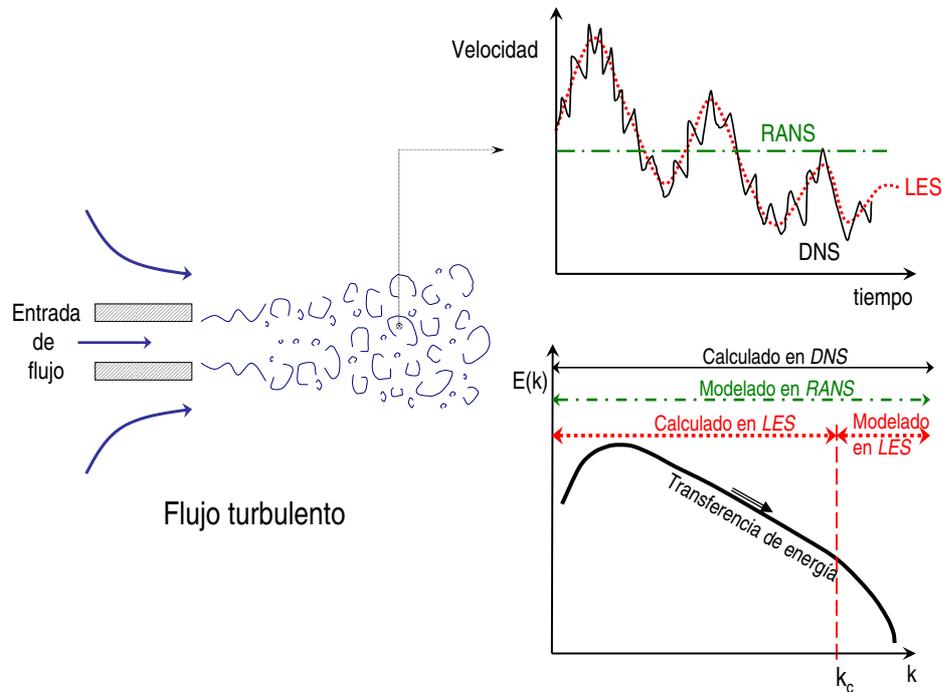


Fig. 1.1: Tratamiento y nivel de aproximación de las técnicas de *CFD* para la predicción de flujos turbulentos

La simulación de las grandes escalas (*LES*) puede considerarse una aproximación intermedia entre *DNS* y *RANS*. En este método, las ecuaciones que gobiernan un flujo (continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y energía) son filtradas para separar las grandes escalas de la turbulencia de las más pequeñas [82, 224, 236]. Las grandes escalas son resueltas explícitamente por las ecuaciones discretizadas, mientras que la turbulencia de pequeña escala (dentro del rango inercial), llamada también submalla o subescala (*SGS*, *sub-grid scale*), es modelada para reemplazar la información perdida en el filtrado. Dado que las pequeñas escalas tienden a ser más homogéneas, universales e independientes de las condiciones de contorno, los modelos son, en principio, más

simples y requieren de menos ajustes cuando son aplicados a diferentes geometrías y flujos que los modelos usados en *RANS*. Al resolver la mayor parte de las escalas, *LES*, al igual que *DNS*, proporciona una solución tridimensional y dependiente del tiempo para las ecuaciones de transporte capturando explícitamente muchos de los efectos del flujo turbulento que son imposibles de apreciar en *RANS*.

Muchos de los los modelos para la turbulencia submalla inicialmente han sido formulados y validados para flujos inertes. Así, el tensor de esfuerzos submalla en las ecuaciones de cantidad de movimiento se modela recurriendo a la hipótesis de Boussinesq (modelos de viscosidad turbulenta) con coeficientes constantes [236, 162, 71] o determinados dinámicamente [83, 82, 133]. Asimismo, en el transporte de escalares, es habitual el modelado de la contribución submalla por medio de la hipótesis de la difusión por gradiente [43, 49, 23, 54, 209]. Esta combinación de estrategias ha sido usada con éxito en la predicción de flujos reactivos; aun cuando, por otro lado, hay cierto consenso general en la existencia de varios aspectos que aún no están completamente claros; por ejemplo, la difusión de especies en sentido contrario al gradiente [268, 260], el modelado de las contribuciones submalla de las correlaciones entre los gradientes de especies y temperatura [148, 100] y, de manera genérica, el análisis de los errores y la independencia de los resultados con los cambios de malla [82, 224, 185, 203]. Como ya se ha dicho, las reacciones químicas y la liberación de calor son procesos que ocurren esencialmente por debajo del nivel de filtrado. Al igual que en *RANS*, estos procesos y su interacción con la turbulencia tienen que ser modelados. Por ello, muchas estrategias son comunes para ambas técnicas [267], aunque con adaptaciones para *LES*. En la siguiente sección se presenta brevemente estas estrategias. Adicionalmente, como parte del desarrollo de esta tesis, en los Capítulos 3 y 4 se profundiza en los aspectos principales del modelado con *LES* de flujos turbulentos reactivos.

1.2.2. Modelado de la combustión turbulenta

El comportamiento y análisis de la combustión turbulenta depende en gran medida de los procesos de mezcla, originados tanto por el transporte turbulento como por el molecular, y sus interacciones con la cinética química. En la descripción matemática y modelización de los flujos reactivos es frecuente clasificar los sistemas de acuerdo al estado de los reactantes a la entrada de la zona donde la reacción tiene lugar. Así, se denominan “no premezclados” o “de difusión¹”, si los reactantes entran segregados; “premezclados”, si entran previamente mezclados y, “parcialmente premezclados” para configuraciones intermedias entre los dos primeros. Dependiendo del tipo de sistema, los modelos en muchos casos son específicos para éste. Sin embargo, en la práctica, es común que coexistan en un mismo flujo todas las categorías (por ejemplo en llamas con zonas de fuerte extinción o en flujos bifásicos) y el análisis requiera hacer uso de la combinación de técnicas de cada sistema o que posean un enfoque común [267, 205].

Otro criterio para clasificar los modelos de combustión turbulenta está relacionado con el ratio de escalas entre la turbulencia y la cinética química. Si la turbulencia es muy intensa, su escala de tiempo es muy pequeña. Si en un sistema se considera que las escalas temporales de la turbulencia son pequeñas comparadas con las de la cinética química, éste se clasifica como de “química finita o lenta”; mientras que si las escalas de tiempo de la turbulencia son grandes y las de la cinética

¹Aunque en realidad en todas las llamas se presenta el fenómeno de difusión y algunos autores sugieren que se abandone esta denominación [274].

química pequeñas, el sistema puede clasificarse como de “química rápida”.

A efectos de describir matemáticamente una llama es común emplear, sin distinción del régimen del flujo, el uso de un escalar que facilite la localización del frente de reacción. En llamas no premezcladas se utiliza la fracción de mezcla ξ ($\xi = 0$ en zonas de puro oxidante, $\xi = 1$ en puro combustible) y en llamas premezcladas una variable de progreso de la combustión c ($c=0$ en gases sin reaccionar, $c=1$ en gases quemados). Junto con estos elementos, algunos autores [267, 87, 263] agrupan los modelos de combustión de acuerdo a la descripción de las propiedades de las llamas:

1. **Modelos basado en la descripción de la química en términos del mezclado turbulento**, limitando la tasa de reacción en función de parámetros asociados a la turbulencia del flujo. En esta categoría se encuentran el modelo *Eddy Break Up (EBU)* [142, 75], *Eddy Dissipation Model (EDM)* [141, 163], el modelo *Bray-Moss-Libby (BML)* [25] y en general los modelos de química rápida (por ejemplo [23]).
2. **Modelos basados en la determinación de la estructura geométrica de la llama** a partir de la definición de un frente de reacción por medio de isosuperficies de ξ_{st} o c^* . El frente de llama se considera una superficie mucho más delgada que cualquier otra escala de longitud del flujo; el análisis se realiza en función de esta superficie y en dirección normal a ésta. La interacción de este frente con la turbulencia se considera mediante la determinación de las propiedades estadísticas del mezclado. En esta categoría se encuentra el modelado con flamelets [184, 43, 109].
3. **Modelos que analizan y recolectan en cada punto del flujo las propiedades de los campos de escalares**. Los valores medios y demás correlaciones podrían ser extraídos a partir de funciones de densidad de probabilidad (*PDF*). El análisis en ocasiones también podría estar ligado con la estructura geométrica de las isosuperficies ξ_{st} o c^* de llama. En esta categoría se encuentran los métodos *CMC (Conditional Moment Closure)* [121, 13, 122], los basados en la ecuación de transporte para la *PDF* conjunta de los escalares [199, 59, 30] y el modelo *Linear Eddy Model (LEM)* [117, 237].

Las tres clasificaciones comparten aspectos o hipótesis físicas y, por tanto, también es común que en el modelado de la combustión turbulenta se utilice una combinación de estrategias [267].

El tipo de estrategia adoptada en el modelado de un flujo turbulento reactivo repercutirá en la exactitud de los resultados, pero también, y quizá de forma más acusada, en las demandas de recursos computacionales. La Figura 1.2 representa esquemáticamente esta relación si se considera, además, que es más correcto asignar una escala logarítmica en los ejes. Por ejemplo, simulaciones con *RANS* son comúnmente llevadas a cabo en aplicaciones prácticas. El uso de *LES* en casos similares incrementa considerablemente los recursos de cómputo, mientras que *DNS* está generalmente fuera del alcance. De manera similar, para la cinética química, los recursos de cómputo escalan en una proporción igual al cuadrado del número total de escalares empleados [35]. Una química detallada incluye al menos varios cientos de pasos y un número considerable de especies que vuelven inviable una implementación directa en aplicaciones prácticas, aun en combinación con *RANS*, por lo que se requieren técnicas que reduzcan esta carga computacional. La interacción entre la química y la turbulencia es otro aspecto que influye en el coste computacional. Los modelos de

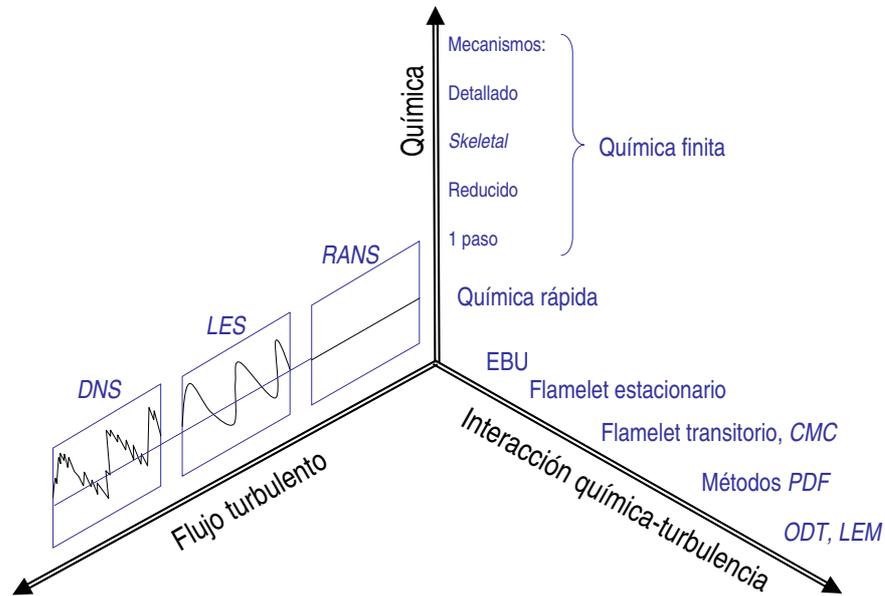


Fig. 1.2: Complejidad y aumento de recursos computacionales en el modelado de flujos turbulentos reactivos. Los ejes pueden considerarse en escala logarítmica [35].

química rápida o de flamelets estacionarios son actualmente factibles de utilizar sin incrementar excesivamente el tiempo global de cómputo con *LES*. Sin embargo, la combinación de estrategias cada vez más sofisticadas proporcionará una mejor descripción del fenómeno.

En el Capítulo 4 se describen con mayor detalle las alternativas para modelar la combustión turbulenta, con énfasis en las usadas en esta tesis: el modelado con flamelets y *LEM* como modelo submalla.

1.2.3. Linear Eddy Model

Como ya se ha mencionado, una *DNS* de flujos complejos es inabordable debido a los altos requisitos computacionales. Por otro lado, en *LES* se recurre frecuentemente a hipótesis para describir los procesos de mezcla en las pequeñas escalas y su interacción con la cinética química. Una posibilidad intermedia es el uso de modelos simples para el campo de velocidad, acoplados con un modelo detallado para el campo de escalares. El modelo *LEM* fue desarrollado con este propósito [72]. En su formulación emplea una aproximación unidimensional que resuelve, para todo el rango de escalas, la evolución de los escalares, por lo que los requisitos computacionales para tratar la cinética química y la difusión molecular sin modelado se reducen considerablemente en comparación con *DNS*. *LEM* es un modelo propuesto por Kerstein inicialmente para flujos no reactivos [111, 112, 113, 114] y posteriormente extendido para flujos reactivos [115, 116]. El modelo involucra dos procesos simultáneos para determinar el campo de escalares. El primero describe su evolución en el dominio unidimensional por medio de un sistema de ecuaciones parabólicas; el segundo consta de una secuencia de eventos estocásticos instantáneos y estadísticamente independientes que alteran el campo y modelan el efecto tridimensional de los torbellinos turbulentos.

Linear Eddy Model como modelo submalla

LEM puede ser empleado como modelo submalla dentro de cada celda de discretización en *LES*. La difusión turbulenta y la convección ocasionadas por las grandes escalas son simuladas en este caso por el intercambio entre celdas de segmentos del subdominio unidimensional. Los procesos propios de *LEM* son, en este caso, gobernados por el rango de escalas entre la longitud de filtrado y la escala de movimiento turbulento más pequeña. En esta tesis se ha empleado este modelo, referido como *S-LEM* (*Subgrid Linear Eddy Model*). Los detalles de su formulación y acoplamiento a *LES* se encuentran en los Capítulos 4 y 5. A continuación se presenta una breve reseña de los trabajos más representativos realizados con esta técnica (en orden cronológico).

1992

McMurtry *et al.* [148] aplicaron por primera vez *LEM* como modelo submalla para describir la combustión de hidrógeno y aire con un modelo para la cinética química de equilibrio parcial.

1996-1997

Menon y Calhoon [152, 29] han aplicado el modelo a una capa de mezcla incorporando por primera vez la reacción química con un mecanismo simple. Los resultados son comparados con datos experimentales y han permitido calibrar los coeficientes para el escalado del mezclado submalla.

Smith y Menon [239, 240] han usado el modelo para estudiar la velocidad de propagación de llamas premezcladas a distintos números de Lewis, comparando los resultados con datos de una *DNS*, obteniendo tendencias similares. Posteriormente [240] han extendido el estudio para estudiar las velocidades de propagación en llamas premezcladas comparando con simulaciones mediante flamelets.

2000

Pannala [174] ha usado el modelo en la predicción de flujos bifásicos sin incluir el término de reacción.

Chakravarthy y Menon [31] han aplicado el modelo para analizar el patrón de flujo, principalmente en zonas de remanso, de llamas premezcladas estabilizadas mediante recirculación. El modelo determina la posición de la isosuperficie G y los resultados son comparados con el modelado convencional de flamelets y con experimentos.

2003

Sankaran y Menon [227, 90] han simulado la combustión en flujos bifásicos (atomizadores) compresibles empleando el modelo para la fase gaseosa e incluyendo términos de reacción química con un mecanismo de un paso. La configuración es simple y ha sido comparada con datos de *DNS*.

Sone y Menon [244] han empleado el modelo para el mezclado submalla, sin incluir combustión, en el interior del cilindro de un motor de combustión interna.

2006-2007

El-Asrag y Menon [65] han simulado dos llamas no premezcladas estabilizadas mediante recirculación con *swirl*. Incluyen un mecanismo de una reacción para el metano [280].

El-Asrag *et al.* [64] han simulado la formación de hollín en llamas premezcladas resolviendo 20 especies con una discretización submalla de 18 elementos e incluyendo la química mediante *ISAT*.

2008-2009

Patel y Menon [181] han estudiado las interacciones en una llama entre la turbulencia y la atomización de un combustible líquido. El mecanismo químico es de 3 pasos con una resolución en

el subdominio de 12 elementos.

Sankaran *et al.* [225] han diseñado una estrategia de cierre por tabulación para *LES* de llamas no premezcladas basado en realizaciones del modelo. La técnica sirve para tabular el estado termoquímico en función de variables filtradas (fracción de mezcla, tasa de disipación y número de Reynolds submalla).

1.2.4. Configuraciones experimentales analizadas

Las configuraciones analizadas en esta tesis son las llamas C, D y E de los laboratorios Sandia [173, 10, 146, 232]. La geometría del quemador es la misma en los tres casos y consta de un chorro central de combustible, compuesto de tres partes de aire por una de metano (en volumen), rodeado por una corriente piloto que mantiene anclada la llama al quemador. Alrededor existe una corriente laminar de aire que proporciona el oxidante complementario para la combustión. El premezclado parcial del metano con aire disminuye los problemas de interferencia por formación de hollín en las mediciones a la vez que produce una llama más robusta, reduciendo su longitud en comparación con llamas de metano puro o diluido con nitrógeno [173]. Por otro lado, las tasas de mezclado son lo suficientemente elevadas para considerar estas llamas como sistemas de difusión, con una zona de reacción cercana a la condición estequiométrica y sin indicios de reacción en las zonas de premezclado ricas en combustible [10].

Las velocidades de las corrientes de combustible y piloto se va incrementando entre las llamas y, por tanto, también el número de Reynolds y la probabilidad de extinción local en el flujo. Los datos experimentales incluyen mediciones de velocidad, temperatura y principales escalares químicos. Están disponibles a través del *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames (TNF)* [173]. Adicionalmente, existen mediciones experimentales de las tasas de disipación de la fracción de mezcla² [106, 107, 8]. En el Capítulo 6 se describen con detalle las características de las llamas analizadas y los trabajos numéricos más relevantes que con ellas se han publicado.

1.3. Objetivos de la Tesis

LES ha alcanzado un considerable grado de madurez para ser empleada en la predicción de los flujos turbulentos reactivos; sin embargo, aún existen varios aspectos que se siguen investigando. Los retos señalados en las primeras secciones de este capítulo incentivan la investigación del fenómeno.

El objetivo general de esta tesis es la predicción y análisis de la estructura submalla de la tasa de disipación y campos de escalares en llamas turbulentas mediante la integración de *Linear Eddy Model* a la Simulación de las Grandes Escalas. El modelado de la combustión se hará a través de dos estrategias diferentes. Por un lado, mediante flamelets estacionarios, suponiendo la estructura submalla de las interacciones entre la cinética química y la turbulencia, permitiendo cálculos numéricos en tiempos de cómputo relativamente asequibles. Por otro lado, empleando *LEM* como modelo submalla para la evolución de los escalares involucrados en el proceso de la combustión, evitando suponer la estructura de las interacciones entre la reacción química y la turbulencia. El modelado con flamelets, junto con los datos experimentales disponibles, validará

²Hasta donde el autor de esta tesis sabe, éstas son las únicas llamas de laboratorio con este tipo de mediciones.

el acoplamiento de procesos entre *LES* y *S-LEM*. A través de la información en los dominios unidimensionales de *S-LEM*, se propone el estudio de la estructura submalla de los escalares y las interacciones entre la cinética química y la turbulencia.

Las llamas experimentales seleccionadas son sistemas clasificados como no premezclados y corresponden a las configuraciones C, D y E de los laboratorios Sandia [173].

La investigación, y por tanto, el desarrollo de esta memoria se ha alcanzado a través de los siguientes objetivos particulares:

- Una revisión general del estado del arte en estrategias de modelado submalla y modelos de combustión para *LES*.
- Implementación del modelado de los esfuerzos submalla en las ecuaciones de cantidad de movimiento
- Implementación de las estrategias más comunes para el modelado de la varianza y tasa de disipación submalla en *LES*.
- Generación de flamelets y tablas de interpolación usando llamas a contraflujo.
- Análisis de la sensibilidad del calculo numérico a los diversos modelos, esquemas, condiciones de contorno y principales algoritmos empleados la investigación.
- Evaluación de la resolución de las mallas de discretización.
- Acoplamiento al proceso de solución de las ecuaciones de transporte en *LES* de los diversos procesos de *Linear Eddy Model* como modelo submalla, primero para un escalar no reactivo y después para incluir el proceso de reacción química.
- Análisis de los requisitos de resolución de *Linear Eddy Model* como modelo submalla.
- Análisis del transporte de las grandes escalas en *S-LEM* e incorporación de contribuciones de alto orden a las distribuciones submalla.
- Predicción y análisis de los resultados con flamelets y de la evolución de la fracción de mezcla en *S-LEM* y su distribución submalla
- Predicción y análisis de los resultados usando *S-LEM* para modelar los escalares y procesos asociados a la combustión submalla.
- Evaluación de las interacciones entra la cinética química y la turbulencia en el modelado de la combustión con *S-LEM*.

1.4. Estructura de la Tesis

La estructura de esta memoria sigue en lo posible la secuencia de objetivos anteriormente señalada. Tras el capítulo introductorio, en el Capítulo 2 se describen las ecuaciones de transporte que describen la dinámica del flujo, válidas en el caso general tanto para régimen laminar como turbulento, así como los principales parámetros asociados a la descripción del fenómeno.

En el Capítulo 3 se introduce el filtrado de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento, necesarias para describir el campo turbulento de flujos no reactivos e incompresibles, así como los modelos para los términos submalla producidos por el proceso de filtrado.

Las ecuaciones filtradas para simular el flujo turbulento reactivo se presentan en el Capítulo 4. Adicionalmente, se describen los principales modelos de combustión que se pueden emplear en el ámbito de *LES*, detallando las empleadas en esta tesis: el modelo de flamelets y *S-LEM*.

En el Capítulo 5 se muestra el método de solución para las ecuaciones filtradas junto con los detalles numéricos que deben ser considerados en el proceso de discretización y acoplamiento de los modelos empleados.

En el Capítulo 6 se describen las principales características de las llamas experimentales, los antecedentes de trabajos previos y se evalúa el comportamiento de los esquemas y modelos numéricos más relevantes.

Los resultados de las simulaciones empleando el modelo de flamelets para la combustión del flujo se presentan en el Capítulo 7. Asimismo, la evolución del transporte de un escalar no reactivo (fracción de mezcla) mediante *S-LEM* se evalúa a través de la comparación con su contraparte en *LES* y con los datos experimentales.

En el Capítulo 8 se muestran los resultados de las simulaciones usando el modelo *S-LEM* para modelar, junto a los procesos propios de mezclado, la combustión submalla. Los resultados son comparados con los obtenidos mediante flamelets y con los experimentales.

Las características de la estructura submalla de los campos de escalares se presentan en el Capítulo 9, donde se analizan las distribuciones submalla de la varianza, tasa de disipación y escalares químicos determinados por *S-LEM*, así como una evaluación de las interacciones entre la cinética química y la turbulencia.

Las conclusiones de la investigación se recopilan en el Capítulo 10.

Algunos análisis desarrollados durante este trabajo se han anexado como apéndices ya que podrían contribuir a la interpretación de los resultados o de sus conclusiones finales.

Capítulo 2

Dinámica de los flujos reactivos

Entre los objetivos de este trabajo se encuentra el modelado numérico de la combustión en sistemas turbulentos. En el capítulo anterior se ha establecido la importancia de modelar numéricamente este tipo de configuraciones. En este capítulo se introduce la descripción matemática indispensable en el análisis del problema considerado. Partiendo de la hipótesis del continuo, se presentan las ecuaciones instantáneas que describen la dinámica para un flujo turbulento y reactivo. Estas ecuaciones expresan leyes de conservación para la masa, cantidad de movimiento, entalpía y conservación de las especies química. El uso de ecuaciones de estado complementa dichas leyes de conservación. El sistema puede simplificarse por medio del uso de un escalar pasivo denominado fracción de mezcla, cuya ecuación homogénea puede describir el estado termoquímico del sistema siempre que se adopten ciertas hipótesis, como por ejemplo, la de igual difusividad para las especies y entalpía. Las ecuaciones presentadas son, en el caso general, válidas tanto para flujo laminar como turbulento. El tratamiento específico para este último se detalla en capítulos posteriores.

2.1. Parámetros relevantes de un flujo turbulento reactivo

En esta sección se describen brevemente algunos conceptos básicos, asociados con las escalas de la turbulencia y reacción química, que son comúnmente empleados en el tratamiento de los flujos turbulentos reactivos¹.

2.1.1. Parámetros de la turbulencia

La turbulencia es un fenómeno que se caracteriza por las fluctuación de las propiedades locales de un flujo a altos números de Reynolds. A efectos matemáticos, una propiedad f puede descomponerse en un valor local medio \bar{f} y en una componente fluctuante f' :

$$f = \bar{f} + f'. \quad (2.1)$$

¹Para un mayor detalle, puede consultarse las referencias [185, 198, 202]

Esta descomposición estadística es la base de la mayoría de las técnicas de modelado de la turbulencia y permite expresar algunos de los parámetros que sirven para caracterizarla:

- I representa la intensidad de la turbulencia de un flujo y se estima como $I = (f')_{rms} / \bar{f}$.
- L , la escala integral de la turbulencia, es una longitud característica de las grandes escalas del movimiento turbulento del flujo; está ligada, por tanto, a la geometría y dimensiones del problema.
- u' es una fluctuación de la velocidad característica del flujo; $u' = \sqrt{\frac{2k}{3}}$, donde k es la energía cinética turbulenta.
- τ_L es un tiempo característico de las escalas grandes, determinado comúnmente como $\tau_L = L/u'$.
- ν es la viscosidad cinemática del fluido; $\nu = \mu/\rho$, donde μ y ρ son la viscosidad molecular y la densidad del fluido respectivamente.
- ϵ es la disipación de energía cinética en calor por unidad de masa; $\epsilon = u'^3/L$.
- η es la escala de movimiento más pequeña presente en el flujo (escala de Kolmogorov), puede calcularse como $\eta = (\nu^3/\epsilon)^{\frac{1}{4}}$.
- τ_η es el tiempo característico de la escala de Kolmogorov, $\tau_\eta = (\nu/\epsilon)^{\frac{1}{2}}$.
- Re_t es el número de Reynolds turbulento, basado en las grandes escalas, $Re_t = u'L/\nu$.
- χ es la tasa de disipación de las fluctuaciones de un escalar f , definida como² $\chi = 2D\overline{(\nabla f')^2}$.

2.1.2. Parámetros químicos

- τ_c es un tiempo químico característico de la creación o destrucción de una especie.
- Da_L es el número de Damköhler de las grandes escalas, definido como la relación entre el tiempo característico de la turbulencia del flujo y el tiempo químico, $Da = \tau_L/\tau_c$.
- Da_η es el número de Damköler de la escala de Kolmogorov, definido como $Da_\eta = \tau_\eta/\tau_c$; también puede expresarse como $Da_\eta = Da_L Re_t^{\frac{1}{2}}$.

2.2. Conservación de la masa

Partiendo de la hipótesis del continuo, la evolución dinámica de un flujo reactivo en fase gaseosa puede expresarse mediante leyes de conservación. En el caso de la masa, esta ley queda expresada matemáticamente mediante la ecuación de continuidad que, en forma diferencial, adopta la forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (2.2)$$

donde \vec{v} y ρ son, respectivamente, la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla gaseosa reactiva.

²Este parámetro se aborda con mayor detalle en el Capítulo 4

2.3. Conservación de la cantidad de movimiento

La conservación de la cantidad de movimiento del flujo es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{v}) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}^j + \rho\vec{f}_m, \quad (2.3)$$

donde p representa la presión, $\vec{\tau}^j$ es el tensor de esfuerzos viscosos y \vec{f}_m representa las fuerzas másicas presentes, por ejemplo la gravedad, \vec{g} .

Mediante la ley de Navier-Poisson se establece que el tensor de esfuerzos viscosos es [3, 11]:

$$\vec{\tau}^j = \mu (\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^T) + \left(\mu_v - \frac{2}{3}\mu\right) (\nabla \cdot \vec{v}) \delta_{ij}, \quad (2.4)$$

donde μ representa la viscosidad molecular de la mezcla gaseosa; μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrico que es nulo para gases monoatómicos y, por lo general, suele despreciarse [274]; y δ_{ij} es la delta de Kronecker, definida como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{para } i = j \\ 0 & \text{para } i \neq j \end{cases}. \quad (2.5)$$

Si la ecuación constitutiva (2.4) es sustituida en la (2.3) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{v}) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \delta_{ij} \right) \right] + \rho\vec{f}_m. \quad (2.6)$$

El principio de conservación de la cantidad de movimiento es una aplicación de la segunda ley de Newton a un elemento fluido [47]. La Expresión (2.6) es una ecuación vectorial que representa, en realidad, tres ecuaciones escalares, una para cada componente de la velocidad (ecuaciones de Navier-Stokes).

2.4. Conservación de las especies químicas

La fracción másica de una especie química, Y_α , en una mezcla de N especies, es:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T}, \quad (2.7)$$

donde m_α es la masa de la especie α y m_T es la masa total de la mezcla, ambas contenidas en el mismo volumen. De acuerdo con la anterior definición se cumple que, en cada posición e instante de tiempo, $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$. En términos de la fracción másica, la ecuación de conservación de la especie α es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}Y_\alpha) = -\nabla \cdot \vec{J}_\alpha + S_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N; \quad (2.8)$$

donde \vec{J}_α es el flujo difusivo y S_α es la tasa de formación neta de la especie α . De la ecuación de continuidad (2.2) se cumple que $\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0$ y $\sum_{\alpha=1}^N \vec{J}_\alpha = 0$. El flujo difusivo de la especie α , \vec{J}_α , se trata en la Sección 2.6

De forma genérica, la tasa de reacción química, S_α , en un sistema químico con R reacciones

presenta la forma:

$$\sum_{\alpha=1}^N s_{\alpha,r}^f A_{\alpha} \rightleftharpoons \sum_{\alpha=1}^N s_{\alpha,r}^b A_{\alpha}, \quad r = 1, \dots, R; \quad (2.9)$$

donde A_{α} representa el símbolo químico de cada especie α y s_{α} su coeficiente estequiométrico. Los superíndices f y b indican el sentido de la reacción: directa (*forward*) e inversa (*backward*) respectivamente.

Cuando la reacción (2.9) es elemental (como sucede a nivel molecular en la naturaleza), la tasa de producción S_{α} viene dada por:

$$S_{\alpha} = W_{\alpha} \underbrace{(s_{\alpha,r}^b - s_{\alpha,r}^f)}_{s_{\alpha,r}} \dot{\omega}_{\alpha,r}, \quad \alpha = 1, \dots, N; \quad (2.10)$$

donde W_{α} es el peso molecular de la especie α y $\dot{\omega}_{\alpha,r}$ es la velocidad de reacción de la especie α , debido a la reacción r . La tasa de reacción neta, $\dot{\omega}_{\alpha,r}$, de la reacción r es:

$$\dot{\omega}_{\alpha,r} = k_{f,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{s_{\alpha,r}^f} - k_{b,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{s_{\alpha,r}^b}, \quad (2.11)$$

donde $[X_{\alpha}]$ es la concentración molar de la especie α y $k_{f,r}$ y $k_{b,r}$ son respectivamente las constantes de reacción directa e inversa de la reacción r . La constante de reacción directa, $k_{f,r}$, puede expresarse con la ley de Arrhenius:

$$k_{f,r} = A_r T^{b_r} e^{\left(-\frac{E_r}{R_c T}\right)}, \quad (2.12)$$

donde A_r es el factor pre-exponencial, b_r es el exponente de la temperatura, E_r es la energía de activación y R_c es la constante universal de los gases. La constante de reacción inversa, $k_{b,r}$, se relaciona con la constante de reacción directa, $k_{f,r}$, mediante la constante de equilibrio:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{k_{e,r}}, \quad k_{e,r} = \exp\left(-\frac{\Delta Z^o}{RT}\right), \quad (2.13)$$

donde ΔZ^o es el cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar dado por:

$$\Delta Z^o = \sum_{\alpha=1}^N (s_{\alpha}^b - s_{\alpha}^f)(U_{\alpha}^o - T_{\alpha} S_{\alpha}^o), \quad (2.14)$$

donde U_{α}^o , T_{α} y S_{α}^o son, respectivamente, la energía interna, la temperatura y la entropía en el estado estándar de la especie α .

2.5. Conservación de la energía

La ecuación de conservación de la energía puede presentarse de diferentes maneras, por ejemplo, en términos de la entalpía o de la temperatura. En el caso más general, la energía total contenida en un volumen fluido, por definición, es la suma de la energía interna, cinética y potencial:

$$e = u + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U, \quad (2.15)$$

donde e es la energía específica total, u es la energía interna y U es la energía potencial; esta última relacionada con $\vec{g} = -\nabla U$.

Considerando la definición expresada por (2.15), la ecuación para la energía total es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(u + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(u + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \\ \nabla \cdot \left(\vec{\tau}^j \cdot \vec{v} \right) - \nabla \cdot (p\vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q} + \dot{Q}_r + \dot{Q}_q, \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde \vec{q} es el flujo difusivo de calor, \dot{Q}_r representa el intercambio de calor por radiación y \dot{Q}_q es el calor generado por reacción química. En la Ecuación (2.16), el término $\nabla \cdot (\vec{\tau}^j \cdot \vec{v})$ representa la potencia de las fuerzas viscosas y $\nabla \cdot (p\vec{v})$ la potencia de las fuerzas de presión.

La Ecuación (2.16) puede transformarse para que aparezca la entalpía:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(h + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(h + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \\ \frac{Dp}{Dt} + \Phi_V - \nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_r + \dot{Q}_q, \end{aligned} \quad (2.17)$$

donde $D/Dt = \partial/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla$ es la derivada sustancial; $\Phi_V = \vec{\tau}^j : \nabla \vec{v}$ es la disipación viscosa y \vec{J}_h representa el flujo difusivo de calor, definido con mayor detalle en secciones posteriores.

Una serie de simplificaciones se puede adoptar para esta ecuación:

- El número de Mach ($Ma = \vec{v}_o / \sqrt{\gamma R_c T_o}$, donde γ es el ratio entre las capacidades térmicas específicas a presión y volumen constante) es pequeño, $Ma \ll 1$, y por lo tanto, la energía cinética comparada con la entalpía puede ser despreciada [282].
- Aun cuando las velocidades en los sistemas sean relativamente bajas, el número de Froude al cuadrado suele ser grande, $Fr^2 = \vec{v}_o^2 / \vec{g} l_o \gg 1$, por lo tanto, la energía potencial suele despreciarse.
- El término Dp/Dt es importante cuando se tienen en el sistema gradientes de presión elevados, como ondas de choque o detonaciones [274], por tanto, habitualmente no es considerado.
- El número de Eckert, $Ec = \vec{v}_o^2 / CpT_o$, es un indicador de la contribución de la disipación de la energía cinética al nivel total de entalpía. Cuando $Ec \ll 1$ el término Φ_V se puede despreciar.

Si se aplican las suposiciones anteriores en la Ecuación (2.17), se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \vec{v} \cdot \nabla (\rho h) = -\nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_r. \quad (2.18)$$

2.6. Ecuaciones adicionales

Las ecuaciones instantáneas presentadas anteriormente deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que proporcionen la densidad y la temperatura, así como con expresiones para los flujos difusivos.

2.6.1. Densidad de una mezcla de gases

En función de la composición, expresada a través de las fracciones másicas, la densidad de la mezcla se calcula como:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}}. \quad (2.19)$$

Si se supone una mezcla de gases ideales:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}}. \quad (2.20)$$

2.6.2. Temperatura

La temperatura se calcula a partir de la definición de la entalpía de la mezcla:

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha}, \quad (2.21)$$

donde h_{α} es la entalpía de cada especie de la mezcla, determinada como la suma de la entalpías térmica y química:

$$h_{\alpha} = \int_{T^o}^T C_{p_{\alpha}} dT + \Delta h_{f,\alpha}, \quad (2.22)$$

donde $C_{p_{\alpha}}$ es la capacidad térmica de la especie, T^o es la temperatura de referencia y $\Delta h_{f,\alpha}$ es el calor de formación de cada especie, definido como el calor liberado cuando un mol de sustancia es formado a partir de sus elementos en el estado estándar [198].

2.6.3. Flujo difusivo de especies químicas

El flujo difusivo de la especie α , \vec{J}_{α} , tiene tres componentes: *i*) por gradiente de especies, *ii*) por gradiente de temperatura (efecto Soret), y *iii*) por gradiente de presión [282]. Estos dos últimos efectos generalmente son despreciados en flujos con combustión [274, 282]. El flujo difusivo, J_{α} , considerando sólo la difusión másica por el gradiente de especies según la ley de Fick, se expresa en su forma más general como [274]:

$$\vec{J}_{\alpha} = \frac{\rho W_{\alpha}}{W_m^2} \sum_{\beta \neq \alpha}^N D_{\alpha\beta} W_{\beta} \nabla X_{\beta}, \quad (2.23)$$

donde los subíndices α y β indican la especie química, $D_{\alpha\beta}$ es el coeficiente de difusión binario, X_{α} es la fracción molar y W_m es igual a $\sum_{\alpha}^N X_{\alpha} W_{\alpha}$. Una forma ampliamente utilizada para esta componente del flujo difusivo másico es:

$$\vec{J}_{\alpha} = -D_{\alpha}^M \rho \frac{Y_{\alpha}}{X_{\alpha}} \nabla X_{\alpha}, \quad (2.24)$$

donde D_α^M es el coeficiente de difusión medio de la especie α en la mezcla de especies. El coeficiente D_α^M se puede calcular a partir del coeficiente de difusión binario, $D_{\alpha\beta}$:

$$D_\alpha^M = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\beta \neq \alpha} x_\beta / D_{\alpha\beta}}. \quad (2.25)$$

El número de Schmidt de la especie α , Sc_α , se define como:

$$Sc_\alpha = \frac{\mu}{D_\alpha \rho}. \quad (2.26)$$

El flujo difusivo de la especie α , J_α , en términos del número de Schmidt se puede reescribir como:

$$\vec{J}_\alpha = -\Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha, \quad \Gamma_\alpha = \frac{\mu}{Sc}. \quad (2.27)$$

2.6.4. Flujo difusivo de calor

El flujo difusivo de calor, \vec{J}_h , en su caso más general, también tiene tres componentes: *i*) por gradiente de temperatura (ley de Fourier), *ii*) por gradientes de concentración (efecto Dufour) y *iii*) debido al flujo difusivo de las especies químicas. Los dos últimos efectos usualmente son despreciables en flujos con combustión [274, 282]. El término \vec{J}_h queda expresado con la ley de Fourier como:

$$\vec{J}_h = -k \nabla T, \quad (2.28)$$

donde k es la conductividad térmica de la mezcla y T es la temperatura.

2.7. Ecuación de conservación para la fracción de mezcla

Como se ha descrito hasta ahora, el sistema de ecuaciones para describir un flujo turbulento reactivo incluye ecuaciones de conservación para la cantidad de movimiento, una ecuación de continuidad, ecuaciones para las especies químicas y una ecuación para la energía; además de diferentes ecuaciones de estado y mecanismos para la cinética química. Resolver este sistema de ecuaciones puede tener un coste computacional excesivo debido, entre otras cosas, a la resolución de la malla de discretización, al número total de ecuaciones a resolver y a la presencia de los términos no lineales asociados a las fuentes por reacción química y que tienen que ser modelados.

En situaciones en las cuales el combustible y el oxidante entran a la cámara de combustión en corrientes distintas y separadas³ (Figura 2.1), es posible suponer una serie de hipótesis que simplifican el sistema de ecuaciones a resolver. Una hipótesis muy común es hacer la suposición de que los coeficientes de difusión de las especies químicas y el de la entalpía son iguales:

$$\Gamma = \Gamma_\alpha = \Gamma_h. \quad (2.29)$$

³Esta configuración es clasificada no premezclada. En el Capítulo 4 se dan más detalles sobre la clasificación de los sistemas de combustión.

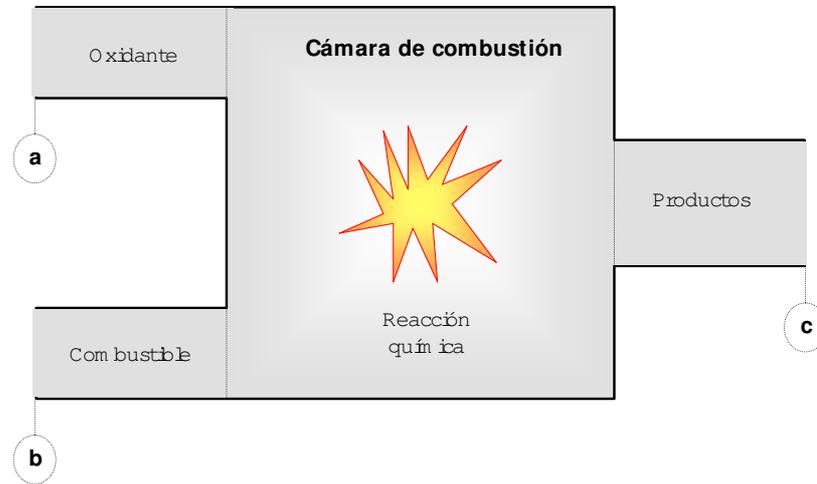


Fig. 2.1: Esquema representativo de un sistema de combustión con dos entradas: oxidante (a) y combustible (b). Los gases calientes producto de la combustión salen por (c).

Teniendo en cuenta que el número de Lewis, Le , se define como:

$$Le = \frac{Sc_\alpha}{Pr} = \frac{k}{\rho D_\alpha C_p}, \quad (2.30)$$

se puede ver que la hipótesis de igual difusividad implica que Le es uno ⁴.

Las especies inertes, o escalares pasivos que no reaccionan, no tienen término fuente, por lo que la suposición de igual difusividad tiene como consecuencia que sus ecuaciones de conservación presenten la misma forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \phi_\alpha) - \nabla \cdot \Gamma \nabla \phi_\alpha = 0, \quad (2.31)$$

donde ϕ_α representa la especie inerte transportada o escalar pasivo. A la Ecuación (2.31) se le denomina ecuación homogénea por carecer de término fuente (S_α).

En la Sección 2.5 se ha manifestado que la ecuación de la entalpía, bajo determinadas hipótesis, no tiene términos fuente, por tanto, en la hipótesis de número de Lewis unitario, la entalpía también responde a la ecuación diferencial homogénea (2.31).

Es posible combinar linealmente las fracciones másicas de las especies reactivas, convenientemente ponderadas con los coeficientes estequiométricos en las distintas reacciones, de forma que el

⁴Para especies ligeras, como el H y H_2 , esta hipótesis no suele ser apropiada ya que su menor masa les confiere una mayor difusividad. Por otro lado, tratándose de un flujo turbulento, la difusividad molecular es frecuentemente despreciable comparada con los mecanismos de transporte turbulento.

término fuente de la ecuación para la variable resultante sea nulo:

$$\phi_1 = Y_c + \frac{Y_p}{1+s}, \quad \phi_2 = \frac{Y_o}{s} + \frac{Y_p}{1+s}, \quad \phi_3 = Y_c - \frac{Y_o}{s}. \quad (2.32)$$

Las variables resultantes de esta operación responden a la ecuación diferencial homogénea. Los subíndices c , o y p se refieren al combustible, oxidante y productos respectivamente, s al coeficiente estequiométrico (masa de oxidante por unidad de masa de combustible necesaria para la reacción completa). Si el sistema a estudiar es como el de la Figura 2.1, con dos condiciones de contorno distintas para estas variables (dos entradas de material), entonces todas las soluciones para esas variables están relacionadas linealmente a través de esas condiciones de contorno:

$$\frac{\phi_\alpha - \phi_{\alpha,a}}{\phi_{\alpha,b} - \phi_{\alpha,a}} = \frac{h - h_a}{h_b - h_a}, \quad (2.33)$$

donde el subíndice a se refiere a la entrada de oxidante y el b a la entrada de combustible (ver Figura 2.1). El cociente de la Expresión (2.33) se denomina fracción de mezcla ξ^5 [12, 125, 282] y, por estar normalizado con las condiciones de contorno, varía entre 0 (entrada a) y 1 (entrada b). En cualquier punto del dominio, ξ representa la fracción de material local que procede de la entrada a , independientemente de las transformaciones químicas en el material debidas a la reacción.

Al ser una combinación lineal de soluciones, la fracción de mezcla también responde a la ecuación diferencial homogénea (2.31), por lo que ξ satisface la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\xi) - \nabla \cdot \Gamma\nabla\xi = 0, \quad (2.34)$$

con condiciones de contorno $\xi=1$ en la entrada de combustible y $\xi=0$ en la de oxidante. Dado que la máxima temperatura determina la localización de la zona de reacción y que, como se ha dicho, bajo ciertas hipótesis la ecuación de transporte de la entalpía presenta la misma forma que (2.31), es común utilizar en la ecuación (2.34) como coeficiente de difusión, Γ , la difusividad térmica [185].

La utilidad de esta variable radica en la posibilidad de determinar el estado termoquímico con un menor número de ecuaciones, siempre que se cumplan las hipótesis en las que se fundamenta.

2.8. Conclusiones

Las ecuaciones diferenciales que gobiernan la dinámica de un flujo con combustión son la ecuación de continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y energía. La ecuación homogénea para la fracción de mezcla ξ , un escalar pasivo o conservado, bajo ciertas hipótesis⁶ facilita la descripción de flujos con combustión.

La forma final del sistema y el número de ecuaciones a resolver dependerá de las hipótesis que se adopten para simplificar el cálculo. En el caso general, estas ecuaciones son válidas tanto para flujo en régimen laminar como turbulento. La complejidad de este último hace que se requieren estrategias de modelado para hacer el cálculo más asequible computacionalmente. Estas estrategias se detallarán en los siguientes capítulos.

⁵También es frecuentemente expresado con las letras Z ó f

⁶Las principales son: flujo adiabático, y coeficientes de difusión iguales para las especies y entalpía.

Capítulo 3

Simulación de las Grandes Escalas del campo de velocidad

Es este capítulo se introduce el filtrado de las ecuaciones que describen la dinámica del flujo turbulento no reactivo. Las ecuaciones instantáneas descritas en el Capítulo 2 son aplicables tanto para régimen laminar como turbulento. Su empleo directo (*DNS*) no es computacionalmente viable puesto que implica resolver todas las escalas presentes del flujo. La Simulación de las Grandes Escalas, o *Large Eddy Simulation (LES)*, es una técnica intermedia entre la *DNS* de un flujo turbulento y el uso de ecuaciones promediadas (*RANS*). *LES* se basa en una operación de filtrado que separa las grandes escalas de la turbulencia, resueltas de manera exacta, de las pequeñas, que son modeladas. En principio, la homogeneidad de las escalas más pequeñas induce a pensar en modelos más simples y con menos ajustes que modelos similares empleados en *RANS*. En este capítulo se presenta el filtrado de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento, necesarias para describir el campo turbulento de flujos no reactivos e incompresibles, así como los modelos empleados para los términos producidos por el proceso de filtrado. Como antecedente, el capítulo comienza con el análisis de los requisitos de simulación típicos de un flujo turbulento; se describen brevemente los fundamentos de *LES* partiendo de la hipótesis de Kolmogorov. Posteriormente, se presenta la operación de filtrado y las ecuaciones filtradas que gobiernan el flujo turbulento para, finalmente, hacer énfasis en el modelado de los términos residuales o submalla, (*SGS*) presentando las técnicas empleadas en esta tesis junto con otras alternativas existentes.

3.1. Requisitos computacionales

El rango de escalas presente en un flujo turbulento es función del número de Reynolds [189, 190] y está delimitado, por un lado, por las escalas macroscópicas que las condiciones concretas del sistema imponen (escalas integrales); y por el otro, por las escalas disipativas. Si, de acuerdo a la

Sección 2.1, L representa el tamaño de las escalas integrales, determinadas por la geometría y condiciones de contorno del flujo, y η es la escala de Kolmogorov, que caracteriza la disipación viscosa de energía, para representar numéricamente un flujo se requerirá al menos L/η nodos o puntos de discretización en cada dirección. Considerando las tres direcciones espaciales, sustituyendo la definición de η (ver sec. 2.1) y operando se tiene que este ratio es equivalente a:

$$\left[\frac{L}{\eta}\right]^3 = \left[Re_t^{\frac{3}{4}}\right]^3 = Re_t^{\frac{9}{4}}. \quad (3.1)$$

Por otro lado, el ratio entre la escala temporal más grande, τ_L , y la más pequeña, τ_η , es proporcional a:

$$\frac{\tau_L}{\tau_\eta} = Re_t^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2)$$

Combinando (3.1) y (3.2) se puede deducir que la discretización (pasos temporales multiplicados por celdas espaciales) es proporcional a:

$$Re_t^{\frac{9}{4}} Re_t^{\frac{1}{2}} = Re_t^{\frac{11}{4}}. \quad (3.3)$$

En el caso de problemas reactivos, como los abordados en esta tesis, hay que considerar además que la química puede introducir escalas aún más pequeñas que la escala de Kolmogorov, lo que exigirá mayores detalles en la simulación [60]. Adicionalmente, hay que considerar el elevado número de especies que componen un esquema realista de reacción química, lo que eleva aún más el coste de una simulación numérica directa. El uso de *DNS* en estos flujos, incluso con simplificaciones termoquímicas, es actualmente inviable para problemas prácticos o de ingeniería¹.

Para flujos turbulentos de aplicaciones prácticas, el uso de ecuaciones promediadas (*RANS*) y, en los últimos años, la Simulación de las Grandes Escalas (*LES*) han sido las soluciones alternativas. En el caso de *RANS*, la turbulencia es modelada promediando todas las escalas de las fluctuaciones, por lo que la estructura del flujo es representada en términos de variables medias. La determinación o calibración de los coeficientes de los modelos frecuentemente es un problema en el estudio de nuevas configuraciones [100]. A pesar de sus limitaciones, durante años esta técnica ha sido aplicada con relativo éxito en diferentes configuraciones de flujos turbulentos, reproduciendo muchos de los efectos importantes presentes en sistemas prácticos y, actualmente, esta técnica aun se sigue desarrollando [279, 62].

En *LES*, las ecuaciones que gobiernan un flujo (continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y entalpía) son filtradas para separar las escalas del movimiento turbulento en función del tamaño de éstas. Las escalas grandes son directamente calculadas por las ecuaciones discretizadas mientras que las pequeñas, denominadas escalas “submalla” o residuales², deben modelarse. Dado que las pequeñas escalas tienden a ser más homogéneas y universales, y por tanto, menos influenciadas por las condiciones de contorno que las grandes escalas, los modelos empleados en *LES* son, en principio, más simples, requiriendo de menores ajustes que los de *RANS* cuando son aplicados en diferentes flujos y geometrías.

Muchos de los trabajos pioneros en *LES* están relacionados con aplicaciones meteorológicas

¹Sin embargo, *DNS* es una herramienta de gran utilidad para realizar estudios de casos con geometrías simples y números de Reynolds bajos (ver por ejemplo [155, 264, 265, 266, 197]).

²En inglés *Subgrid-Scale*, (*SGS*)

[236, 132, 52] y en la actualidad es una herramienta muy utilizada usada en el estudio de flujos atmosféricos [143, 55, 5]. Por otro lado, gran parte del desarrollo de modelos en *LES* se ha enfocado principalmente en el estudio de turbulencia isotrópica [124, 34] y en flujos en canales [50, 158, 188]. Sin embargo, estos avances han incentivado el uso de *LES* en el modelado de flujos reactivos, principalmente mediante la combinación de los avances y experiencia adquirida con ésta técnica en flujos no reactivos y la adaptación de modelos de combustión ampliamente utilizados y validados en el contexto de *RANS*. Asimismo, los avances en las capacidades de los equipos de cómputo motiva el desarrollo y mejora de nuevos modelos y algoritmos numéricos, con lo que *LES* es cada vez más utilizada en la simulación de flujos con geometrías complejas en aplicaciones prácticas [2, 93, 157].

En las siguientes secciones, se resume la deducción de las ecuaciones empleadas en *LES*, partiendo de la operación de filtrado y su aplicación a las ecuaciones de Navier-Stokes para un flujo turbulento no reactivo. El modelado con *LES* de flujos turbulentos reactivos se abordará en el siguiente capítulo.

3.2. *LES* del campo de velocidad

La Simulación de las Grandes Escalas puede considerarse una técnica intermedia entre la simulación numérica directa, *DNS*, y el empleo de ecuaciones promediadas, *RANS*. Por tanto, su empleo está motivado por las limitaciones de *DNS* y las propias de *RANS*. En *LES*, las grandes escalas transitorias y tridimensionales son directamente calculadas, mientras que los efectos de las escalas más pequeñas del movimiento son representadas con modelos. En principio, estos modelos son más simples que los empleados en *RANS* debido por un lado, al carácter universal e isotrópico de las pequeñas escalas, y por otro, a la captura directa de las grandes escalas, irregulares y afectadas principalmente por la geometría del flujo y sus condiciones de contorno.

La base teórica de *LES* parte del concepto denominado “cascada de energía”, que, a grandes rasgos, parte de la idea de que la turbulencia puede considerarse como un conjunto de torbellinos de diferentes tamaños o escalas [213]. Este concepto, ampliado por Kolmogorov [123], establece que la energía cinética, dependiente de la geometría y naturaleza del flujo, alimenta a la turbulencia en las escalas más grandes del flujo. Esta energía es transferida, sin intervención testimonial de efectos viscosos, de las escalas mayores a escalas menores, en un proceso continuo hasta las escalas más pequeñas, definidas por la escala de Kolmogorov (η), donde se disipa por efecto de la viscosidad (ver figura 3.1).

LES consiste básicamente de cuatro pasos conceptuales [202]:

1. La definición de una operación de filtrado para descomponer el campo de velocidades del flujo $\vec{v}(\vec{x}, t)$ en la suma de un componente filtrado o resuelto, $\bar{\vec{v}}(\vec{x}, t)$, y en un componente residual o submalla, $\vec{v}'(\vec{x}, t)$. La velocidad filtrada $\bar{\vec{v}}(\vec{x}, t)$ representa el movimiento de las grandes escalas.
2. Las ecuaciones para la evolución de la velocidad filtrada son deducidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes. Las ecuaciones filtradas presentan la misma forma que las ecuaciones exactas, a excepción de un término extra que representa el tensor de esfuerzos residuales o submalla, τ_{ij}^s .

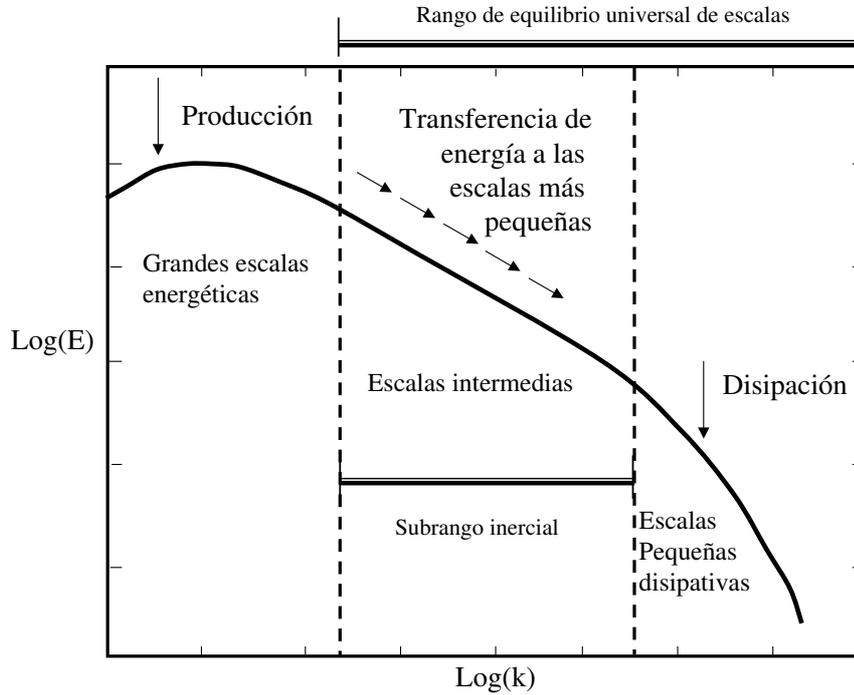


Fig. 3.1: Cascada de energía cinética (en escala logarítmica) de los torbellinos de grandes escalas a los de pequeña escala. Eje vertical: energía cinética. Eje horizontal: número de onda.

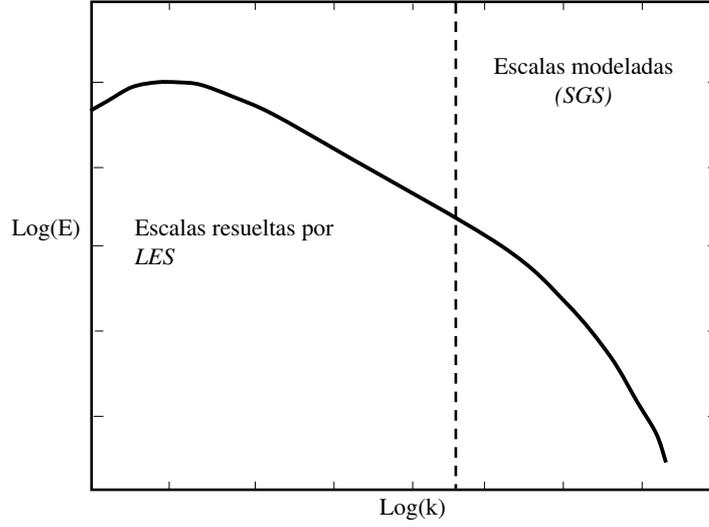
3. La definición de una estrategia de cierre para el tensor de esfuerzos residuales, τ_{ij}^s ; lo habitual es cerrar la ecuación mediante un modelo de viscosidad turbulenta.
4. Finalmente, las ecuaciones filtradas son resueltas numéricamente para $\bar{v}(\vec{x}, t)$ que proporciona una aproximación del campo turbulento de velocidades en cada paso de tiempo considerado.

3.3. Operación de Filtrado

En *LES*, el campo de velocidades es filtrado para que $\bar{v}(\vec{x}, t)$ sea discretizado y resuelto en escalas espaciales más grandes que η y por tanto, con mallas menos densas que las empleadas con *DNS*. Específicamente, el tamaño de celda Δx requerido es proporcional al tamaño de la longitud característica del filtro, Δ , cuya escala estará dentro del subrango inercial del movimiento del flujo (ver figuras 3.1 y 3.2).

Formalmente, el proceso de remover las escalas no resueltas puede ser descrito como la aplicación de una operación general de filtrado a una función $\bar{f}(\vec{x}, t)$. El valor de la función filtrada se define como [127]:

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int_{\Omega} G(\vec{x}, \vec{x}') f(\vec{x}') d\vec{x}'. \quad (3.4)$$

Fig. 3.2: División del espectro de energía en *LES*

La integración se realiza sobre todo el dominio Ω . La función $G(\vec{x}, \vec{x}')$, cuya dependencia funcional con \vec{x} y \vec{x}' determina el efecto del filtrado sobre la variable, satisface la condición de normalización:

$$\int_{\Omega} G(\vec{x}, \vec{x}') d\vec{x}' = 1. \quad (3.5)$$

Si la dependencia espacial es $G = G(\vec{x} - \vec{x}')$, el filtrado será homogéneo; si la dependencia en todas las direcciones del espacio es la misma, será isótropo. Un promediado local, homogéneo e isótropo ponderado uniformemente en un entorno cúbico de lado Δ viene dado por la función filtro:

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = g(x - x')g(y - y')g(z - z'), \quad (3.6)$$

donde,

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = \begin{cases} 1/\Delta & \text{para } |x_i - x'_i| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{para } |x_i - x'_i| > \Delta/2 \end{cases}. \quad (3.7)$$

Este tipo de función filtro se denomina de “caja” (*box filter* [224]) o de promedio móvil, caracterizado completamente por el tamaño Δ de la “caja” de filtrado. En su forma general se puede expresar como:

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; a(\vec{x})) = \prod_{i=1}^3 g_i(x_i - x'_i; a(\vec{x})), \quad (3.8)$$

donde $a(\vec{x})$ implica que el ancho de filtro Δ puede ser una función de la posición. Este es el tipo de filtro más común en simulaciones donde el filtro está asociado a la propia discretización de las ecuaciones a través de la malla, como es el caso de este trabajo. Otros filtros introducen un peso dependiente de la distancia $x_i - x'_i$, pero en todos ellos es posible definir un tamaño característico.

Tabla 3.1: Funciones de filtro en una dimensión empleadas en *LES* en espacio físico y en espacio de Fourier [202, 224]

Filtro	$g(x - x')$	$\widehat{g}(k)$
Caja (<i>box</i> o <i>top-hat</i>)	$\frac{1}{\Delta}$ si $ x - x' \leq \frac{\Delta}{2}$, 0 resto de los casos.	$\frac{\text{sen}(k \frac{\Delta}{2})}{\frac{1}{2}k\Delta}$
Gaussiano	$(\frac{6}{\pi\Delta^2})^{(0,5)} e^{-\frac{6x^2}{\Delta^2}}$	$e^{-\frac{k^2\Delta^2}{24}}$
Elíptico	$\frac{1}{4\pi\Delta^2} \frac{1}{(x-x')} e^{-\frac{(x-x')}{\Delta}}$	diverge
De corte (<i>cut-off</i>) espectral	$\frac{2\text{sen}(\pi \frac{(x-x')}{\Delta})}{\pi(x-x')} = \frac{2\text{sen}(k_c(x-x'))}{\pi(x-x')}$	1 si $ k \leq k_c = \frac{\pi}{\Delta}$, 0 resto de los casos.

En algunos casos, como en (3.7), la definición del tamaño característico se basa en el filtrado como promediado en el espacio físico, coincidiendo con la dimensión de la zona en la que el promediado tiene efecto; en otros casos, la definición del tamaño característico se asocia al número de ondas (\vec{k}) a partir del cual las fluctuaciones son eliminadas definiendo la operación de filtrado en el espacio de Fourier.

La transformada de Fourier de la operación de filtrado (3.4) es:

$$\widehat{\bar{f}}(\vec{k}, t) = \widehat{G}(\vec{k}) \widehat{f}(\vec{k}, t), \quad (3.9)$$

donde $\widehat{f}(\vec{k}, t)$ es la transformada de Fourier de la función $f(\vec{x}, t)$ y $\widehat{G} = \prod_{i=1}^3 \widehat{g}_i(k_i)$.

En la literatura se pueden encontrar varias distribuciones propuestas como funciones filtro, algunas de las cuales están listadas en el cuadro 3.1 en espacio físico y en espacio de Fourier para filtros en una dimensión. La extensión tridimensional es inmediata.

Las propiedades y reglas que cumplen los operadores de filtrado son:

- Como se ha indicado, la integral del filtro en el espacio es igual a la unidad ($\int_{\Omega} G(\vec{x}, \vec{x}') d\vec{x} = 1$) y han de ser nulos ($G(\vec{x}, t) = 0$) en el contorno del dominio de operación.
- A diferencia del promediado de Reynolds, aplicando la misma operación de filtrado dos veces cambia el valor de la función, es decir,

$$\overline{\bar{f}} \neq \bar{f}. \quad (3.10)$$

Solo el filtro de corte espectral es la excepción que cumple que

$$\overline{\bar{f}} = \bar{f}. \quad (3.11)$$

- Las operaciones con funciones filtradas cumplen:

$$\overline{f + h} = \bar{f} + \bar{h} \quad (3.12)$$

$$\overline{cf} = c\bar{f}, \quad (3.13)$$

donde h es una función y c una constante. Por el contrario, se tiene que

$$\overline{fh} \neq \bar{f} \bar{h}. \quad (3.14)$$

- De las propiedades anteriores, se deduce que la operación de filtrado sobre la componente de pequeña escala de un campo $f' = f - \bar{f}$ no dará cero:

$$\overline{f - \bar{f}} = \bar{f} - \bar{f} \neq 0. \quad (3.15)$$

- De cara a la obtención de las ecuaciones de evolución, sólo el filtrado homogéneo (isótropo) conmuta con los operadores de derivación temporal y espacial:

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, t)} = \frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(\vec{x}, t), \quad (3.16)$$

$$\overline{\frac{\partial}{\partial x_i} f(\vec{x}, t)} = \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{f}(\vec{x}, t). \quad (3.17)$$

En el caso de que el filtrado no sea homogéneo, por ejemplo con mallas no uniformes, suponer la conmutación de las derivadas espaciales introduce en el sistema errores de truncado en estos operadores [86]; sin embargo, habitualmente son ignorados.

3.4. Ecuaciones de evolución para las grandes escalas

Las ecuaciones que gobiernan la evolución de las grandes escalas se obtienen al aplicar la operación de filtrado definida anteriormente a las ecuaciones de Navier-Stokes. Mediante esta operación se separan del cálculo las grandes escalas, que quedan representadas explícitamente, de las más pequeñas que deberán ser modeladas si se desea incluir su efecto. Debido a que la ecuación de continuidad es lineal, el filtrado no cambia su forma original significativamente. Para un fluido incompresible:

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0. \quad (3.18)$$

La ecuación de conservación de cantidad de movimiento es filtrada de la misma manera:

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (3.19)$$

La Ecuación (3.19) es análoga a la obtenida en el promediado de Reynolds en *RANS*, pero dada la no linealidad de la ecuación:

$$\overline{u_i u_j} \neq \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (3.20)$$

Por tanto, las ecuaciones para cada una de las componentes de la velocidad quedan abiertas, con términos desconocidos procedentes de correlaciones no lineales, que representan los efectos sobre los campos de gran escala de las correlaciones entre los campos turbulentos [101]. Este término debe por tanto ser modelado. La manera habitual de hacerlo es descomponiendo los términos no lineales como la suma de un término dependiente sólo de los campos de gran escala y un término

que represente el efecto de las correlaciones sobre las grandes escalas:

$$\overline{u_i u_j} = \overline{u_i} \overline{u_j} + \underbrace{(\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j})}_{\tau_{ij}^s}. \quad (3.21)$$

El término τ_{ij}^s que compensa la desigualdad en (3.20) se suele llamar “tensor de esfuerzos submalla o subescala” (*Sub-Grid Scale stresses, SGS*) por analogía a los esfuerzos de Reynolds. En sentido estricto no son esfuerzos; se denominan así por la manera en que son tratados y no por su naturaleza física; representan las interacciones entre las grandes escalas del flujo de cantidad de movimiento que se simulan y las pequeñas que han sido filtradas y, por tanto, modeladas [69, 70]. Introduciendo τ_{ij}^s en la Ecuación (3.19) se obtiene:

$$\frac{\partial(\rho \overline{u_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \overline{u_i} \overline{u_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij}^s \right]. \quad (3.22)$$

En la Ecuación (3.22), la convección de gran escala está expresada de manera habitual, con un término que representa el transporte de cantidad de movimiento de las escalas resueltas; además, es un término cerrado. Los efectos de las escalas no resueltas sobre el flujo quedan incluidos en τ_{ij}^s . La descomposición hecha por Leonard [127] demuestra que este término no es únicamente función de correlaciones entre pequeñas escalas. Si $u_i = \overline{u_i} + u'_i$, se tiene que:

$$\overline{u_i u_j} = \overline{(\overline{u_i} + u'_i)(\overline{u_j} + u'_j)} = \overline{u_i} \overline{u_j} + \overline{u_i u'_j} + \overline{u_j u'_i} + \overline{u'_i u'_j}. \quad (3.23)$$

Agrupando miembros:

$$\tau_{ij}^s = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} = \underbrace{(\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j})}_{L_{ij}} + \underbrace{\overline{u_i u'_j} + \overline{u_j u'_i}}_{C_{ij}} + \underbrace{\overline{u'_i u'_j}}_{R_{ij}}. \quad (3.24)$$

En resumen, el tensor τ_{ij}^s puede expresarse como:

$$\tau_{ij}^s = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij}. \quad (3.25)$$

La Expresión (3.25) se llama “descomposición de Leonard” o “triple descomposición”. Sólo R_{ij} es la parte del tensor puramente dependiente de las pequeñas escalas y se denomina “tensor de esfuerzos de subescala de Reynolds” por tener la misma forma y función que el correspondiente tensor en *RANS*. C_{ij} se denomina “tensor de esfuerzos cruzados” y refleja las interacciones entre grandes y pequeñas escalas y L_{ij} se llama “tensor de esfuerzos de Leonard” y representa las interacciones entre grandes escalas [224, 286]. A pesar de lo anterior, τ_{ij}^s es comúnmente nombrado en la literatura como tensor de esfuerzos subescala o submalla (en esta tesis se usará indistintamente esta denominación).

3.5. Estrategias de cierre para las ecuaciones filtradas

El modelado de los efectos de las escalas no resueltas sobre el flujo de gran escala puede describirse como un problema de cierre en las ecuaciones filtradas (3.22). El problema por tanto consiste en la manera de tomar en cuenta los efectos del campo fluctuante u'_i , representado en el

término $\nabla \tau_{ij}^s$, en la ecuación de evolución para campo filtrado \bar{u}_i . Las estrategias para el modelado de los términos submalla pueden clasificarse en dos grupos [224]:

- *i)* Modelado estructural: consiste en hacer una aproximación del tensor τ_{ij}^s reconstruyéndolo a partir de la evaluación de \bar{u}_i o de una expansión en series. El modelado consiste por tanto en usar relaciones de la forma $u'_i = \mathcal{H}(\bar{u}_i)$ o $\tau_{ij}^s = \mathcal{H}(\bar{u}_i)$.
- *ii)* Modelado funcional: consiste en modelar la acción de los términos de subescala con la cantidad \bar{u}_i y no propiamente con el tensor τ_{ij}^s , introduciendo un término disipativo. Esta hipótesis de cierre puede expresarse de la forma $\frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij}^s = \mathcal{H}(\bar{u}_i)$. Esta es la estrategia más común y es la empleada en esta tesis. Los modelos de este tipo suelen denominarse modelos de viscosidad turbulenta (*eddy viscosity models*).

3.6. Modelado funcional: Modelos de viscosidad turbulenta

El modelado de los términos subescala se ha basado principalmente en el principio de que el efecto de τ_{ij}^s es el incremento del transporte y la disipación [182]. Los modelos de viscosidad turbulenta suponen que la interacción entre las grandes y pequeñas escalas de un flujo turbulento desarrollado se establece principalmente como un intercambio energético de tipo disipativo. Estableciendo una analogía entre el movimiento molecular y la turbulencia de pequeña escala, este fenómeno estaría reflejado en las ecuaciones como un incremento en la viscosidad efectiva del flujo, definida como:

$$\nu_{ef} = \nu + \nu_t. \quad (3.26)$$

De este modo, ν_t es definida como viscosidad turbulenta que se añade numéricamente a la viscosidad del fluido ν , incrementando la disipación de las escalas simuladas del flujo. La tasa de disipación de la energía puede estimarse de la dinámica de las grandes escalas en un flujo turbulento a través de un escalado del movimiento por medio de una longitud y velocidad características [257]. Esto se consigue aplicando la hipótesis del gradiente de Boussinesq para el transporte turbulento [259]. En las ecuaciones de Navier-Stokes, el movimiento molecular se representa como un término de transporte de cantidad de movimiento proporcional al gradiente de velocidad, a través de la viscosidad. De forma equivalente, el efecto del movimiento turbulento asociado a las escalas no resueltas se modela como:

$$\tau_{ij}^s - \frac{1}{3} \tau_{kk}^s \delta_{ij} = -\nu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -2\nu_t \bar{S}_{ij}, \quad (3.27)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y \bar{S}_{ij} es el tensor velocidad de deformación. Cuando el flujo es turbulento existe una interacción entre escalas de tamaño similar [259], de manera que la transferencia de energía entre las escalas resueltas y las filtradas estaría asociada con la longitud característica de las escalas más pequeñas que sean resueltas. Por ello, la hipótesis del gradiente se aplicaría de forma local al transporte asociado con los esfuerzos residuales en un flujo turbulento. Los modelos de viscosidad turbulenta tienen la misma función que los correspondientes modelos para los esfuerzos de Reynolds en *RANS*; sin embargo, en el caso de *LES* la viscosidad turbulenta representa los efectos turbulentos de las pequeñas escalas sobre las grandes, a diferencia de *RANS* donde se busca representar el efecto global de todas las escalas.

3.6.1. El modelo de Smagorinsky

El primer modelo para *LES* fue propuesto por Smagorinsky [236] en 1963 y en la actualidad sigue siendo uno de los más utilizados. Algunos autores consideran este modelo como una adaptación del modelo de longitud de mezcla de Prandtl [217].

Por argumentos dimensionales, la viscosidad turbulenta se puede definir a partir de una longitud característica l^* y una velocidad característica u^* de las escalas filtradas como:

$$\nu_t \propto l^* u^*. \quad (3.28)$$

Por tanto, es de esperarse que los esfuerzos de subescala τ_{ij}^s sean:

$$\tau_{ij}^s \propto l^* u^* \left(-\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right). \quad (3.29)$$

Suponiendo que el tensor de esfuerzos residuales o subescala es simétrico, τ_{ij}^s puede escribirse como:

$$\tau_{ij}^s = -\rho \left(\underbrace{C_\nu l^* u^*}_{\nu_t} 2\bar{S}_{ij} - \frac{2}{3} k^s \delta_{ij} \right), \quad (3.30)$$

donde C_ν es una constante de proporcionalidad. En *LES*, la longitud característica es proporcional a Δ , la longitud del filtro, mientras que la velocidad característica es extraída a partir de la energía cinética de las pequeñas escalas, $k^s = (1/2)\tau_{kk}^s$, de acuerdo a la siguiente definición,

$$u^* \propto \sqrt{k^s}. \quad (3.31)$$

Una aproximación para k^s se obtiene empleando nuevamente la hipótesis de equilibrio local para el transporte de los esfuerzos residuales, de tal manera que,

$$k^s \propto 2\Delta^2 (\bar{S}_{ij})^2. \quad (3.32)$$

Considerando asimismo la definición (3.28) resulta que para el modelo de Smagorinsky, la viscosidad turbulenta ν_t en (3.29) es:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\bar{S}|, \quad (3.33)$$

donde $|\bar{S}| = (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{\frac{1}{2}}$. Δ es la longitud asociada con el filtro en el espacio tridimensional, el cual está comúnmente basado en la resolución espacial de la malla. Esta longitud, al no tener una malla con un espaciado uniforme Δ , es calculada en esta tesis como:

$$\Delta = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.34)$$

Esta aproximación, sugerida por Deardoff [50], ha demostrado ser adecuada cuando se tienen ratios de aspecto grandes en las celdas [212]. Sin embargo, es posible emplear otras combinaciones como por ejemplo:

$$\Delta = \sqrt{\frac{(\Delta_x)^2 + (\Delta_y)^2 + (\Delta_z)^2}{3}}. \quad (3.35)$$

El término C_s es la constante de Smagorinsky que puede ajustarse dependiendo de otros parámetros flujo, principalmente del número de Reynolds. Sin embargo siempre está definido como un valor real positivo, por lo que el modelo es puramente disipativo, es decir, $\nu_t \geq 0$. Existen diversas maneras de calcular el valor de C_s . Suponiendo turbulencia isotrópica se tiene que, $C_s \approx 0,2$ [224], pero se ha encontrado, por ejemplo, que para simular el flujo en canales, C_s tiene que ser reducido a 0.065, lo que produce una disminución de la viscosidad turbulenta en casi un orden de magnitud [69]. Adicionalmente, en regiones cercanas a paredes el valor tiene que ser reducido aún más [158]. Una estrategia comúnmente utilizada es el uso de una función amortiguadora (*damping*), similar a las empleadas en los modelos *RANS*, para reducir la viscosidad turbulenta cerca de las paredes. La función más común, es la de van Driest, que actúa sobre el parámetro C_s de la siguiente manera:

$$C_s = C_{s0}D(y^+), \quad (3.36)$$

donde $D(y^+)$ se calcula como:

$$D(y^+) = 1 - e^{-\frac{y^+}{A^+}}. \quad (3.37)$$

y^+ es la distancia normalizada a la pared ($y^+ = yu_\tau/\nu$) y A^+ es una constante cuyo valor generalmente es de 25. Sin embargo, el comportamiento de esta función es tal que $\nu_t \propto (y^+)^2$ para y^+ pequeños, mientras que el comportamiento adecuado debería ser $\nu_t \propto (y^+)^3$, por lo que una función *damping* alternativa que se ha propuesto es [74]:

$$D(y^+) = \left(1 - e^{-\left(\frac{y^+}{A^+}\right)^3}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.38)$$

Adicionalmente, el modelo de Smagorinsky presenta algunos otros inconvenientes. Tanto en regiones cercanas a las paredes como en regiones donde el flujo sea laminar, el modelo predice un comportamiento asintótico incorrecto [292]. El empleo de leyes de pared mejora el comportamiento cerca de las paredes, pero en flujos laminares, el modelo aún predice que $\tau_{ij}^s > 0$. Algunos autores [191, 271] también han encontrado que predice un exceso de disipación en flujos de transición. El modelo, al ser puramente disipativo, no permite eliminar la transferencia de energía ni predecirla en sentido inverso, es decir de las escalas pequeñas a las grandes, fenómeno conocido como *backscatter* que en algunos flujos de transición puede ser importante [57, 58, 191]. Por tal razón se han ido introduciendo algunas modificaciones al modelo original.

Modelo Smagorinsky-Lilly

Una de las posteriores modificaciones al modelo de Smagorinsky fue propuesta por Lilly [131, 132] y busca mejorar el modelado principalmente en flujos turbulentos confinados donde las paredes ejercen una fuerte influencia. En este modelo, la viscosidad turbulenta ν_t es modelada como:

$$\nu_t = L_s^2 |\bar{S}|. \quad (3.39)$$

La modificación al modelo original de Smagorinsky consiste en el cálculo de L_s , la longitud de

mezcla de las escalas no resueltas, determinada como:

$$L_s = \min(\kappa D, C_s \Delta), \quad (3.40)$$

donde κ es la constante de von Kármán ($\kappa=0.42$), D es la distancia a la pared más cercana. C_s y Δ están definidos como en el modelo original de Smagorinsky. Lilly [131, 132] determinó un valor para $C_s=0.23$. Sin embargo, este valor resulta ser excesivo en la mayoría de los casos y es comúnmente se modifica de la misma manera que en el modelo original.

Modelo RNG-Smagorinsky

Este modelo, deducido por Yakhot *et al.* [290], permite modelar flujos turbulentos con bajos números de Reynolds y pretende mejorar los efectos de la transición a la turbulencia y el cálculo en regiones cercanas a la pared.

La teoría *RNG* (*Re-Normalization Group*) permite deducir una viscosidad efectiva, $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$, donde μ y μ_t son las viscosidades molecular y turbulenta respectivamente, con la siguiente expresión:

$$\mu_{ef} = \mu[1 + H(x)]^{1/3}. \quad (3.41)$$

En la expresión anterior, $H(x)$ es la función *Heaviside*:

$$H(x) = \begin{cases} x & \text{para } x > 0 \\ 0 & \text{para } x \leq 0 \end{cases}, \quad (3.42)$$

donde x está definida como,

$$x = \frac{\mu_s^2 \mu_{ef}}{\mu^3} - C \quad (3.43)$$

y μ_s , acorde al modelo original de Smagorinsky se calcula como:

$$\mu_s = \rho(C_{rng} \Delta)^2 |S|. \quad (3.44)$$

La teoría indica que $C_{rng}=0.157$ y $C=100$. El comportamiento del modelo determina que en regiones altamente turbulentas del flujo ($\mu_t \gg \mu$), $\mu_{ef} \simeq \mu_s$, con lo que el modelado de τ_{ij} se reduce al modelo original de Smagorinsky, aunque con diferente constante. Por otro lado, en regiones de bajo número de Reynolds, $\mu_{ef} \simeq \mu$ con lo que la disipación del modelo quedaría cancelada en estas zonas.

3.6.2. Modelado dinámico

Durante la pasada década se ha conseguido avanzar en la formulación del modelado submalla o residual, particularmente cuando las geometrías son complejas. En la práctica, es común encontrar flujos con diferentes regímenes (capa límite, chorros, desprendimiento de vórtices, etc.). Es sabido que modelos con coeficientes fijos como el de Smagorinsky requieren que estos sean modificados dependiendo del tipo y configuración del flujo analizado. El modelado dinámico [83, 85, 159] está exento de esta limitación ya que el coeficiente C_s es función del espacio y tiempo. La idea central del modelo dinámico consiste en un proceso de filtrado doble, el cual conduce a una expresión cerrada comúnmente conocida como la identidad de Germano [81] que relaciona esfuerzos residuales a

dos diferentes niveles de filtrado. El procedimiento consiste, por tanto, en introducir un segundo filtrado (*test*) de escala mayor, denotado aquí por \widetilde{G} , sobre el campo de gran escala. El ancho del filtro *test* típicamente se toma como el doble del filtro asociado a la malla, es decir, $\widetilde{\Delta} = 2\overline{\Delta}$.

Después de aplicar el filtro *test* a las ecuaciones de Navier-Stokes, los esfuerzos T_{ij}^s serían:

$$T_{ij}^s = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}, \quad (3.45)$$

donde se debe considerar que, por ejemplo, \widetilde{f} correspondería a un campo f filtrado con el segundo filtro $\widetilde{\Delta}$. De forma similar, $\widetilde{\widetilde{f}}$ correspondería a un campo doblemente filtrado con un filtro de tamaño característico $\widetilde{\Delta}$. Si para los esfuerzos residuales del primer filtrado, el modelo usado es el modelo de Smagorinsky:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} = -2C \Delta^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij}, \quad (3.46)$$

donde se ha sustituido C_s^2 por C y se permite que este parámetro tome valores negativos (*backscatter*). Para los esfuerzos *test* T_{ij} se puede escribir:

$$T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} = -2C \widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}| \widetilde{S}_{ij}, \quad (3.47)$$

donde se supone que C es la misma para ambos, es decir, que no depende del tamaño del filtro.

Germano [81] encontró la siguiente relación matemática exacta entre los esfuerzos en los dos niveles de filtrado y los campos filtrados:

$$T_{ij} - \widetilde{\tau}_{ij} = (\widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u_i} \overline{u_j}}) - (\widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u_i} \overline{u_j}}) = \widetilde{\overline{u_i} \overline{u_j}} - \widetilde{\overline{u_i}} \widetilde{\overline{u_j}} = \mathcal{L}_{ij}, \quad (3.48)$$

donde \mathcal{L}_{ij} son esencialmente los esfuerzos de Leonard asociados con el filtro *test* [69]. Esta identidad matemática, conocida como identidad de Germano o tensor de esfuerzos turbulentos resueltos, representa la contribución de la región entre el filtro *test* y el filtro asociado con la malla (figura 3.3) y es la base del modelado dinámico, ya que permite establecer relaciones entre los tensores de esfuerzos a dos niveles por ser el tensor \mathcal{L}_{ij} calculable a partir de campos a gran escala. Si, como se ha mencionado previamente, ambos tensores pueden determinarse con el mismo modelo, esta relación establece una condición para el valor de C .

Sustituyendo las ecuaciones (3.46) y (3.47), la identidad (3.48) queda determinada, aunque de forma aproximada, puesto que los esfuerzos son reemplazados por el modelado [189]. Así, se obtiene un sistema de cinco ecuaciones independientes para determinar el valor de C .

Al quedar C multivaluada, Germano *et al.* [83] propusieron un método para obtener un único valor de C . Considerando sólo la parte desviatoria del tensor \mathcal{L}_{ij} (puesto que para el modelado de la viscosidad turbulenta sólo se ha considerado los tensores con traza cero) se tiene:

$$\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3} \mathcal{L}_{kk} \delta_{ij} \equiv \mathcal{L}_{ij}^d = -2C \left[\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}| \widetilde{S}_{ij} + \Delta^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} \right] = -2C M_{ij}. \quad (3.49)$$

El método se basa en la suposición de que C varía muy suavemente en el espacio y es posible extraerla de la operación de filtrado en la Ecuación (3.49). Las 5 ecuaciones resultantes se contraen

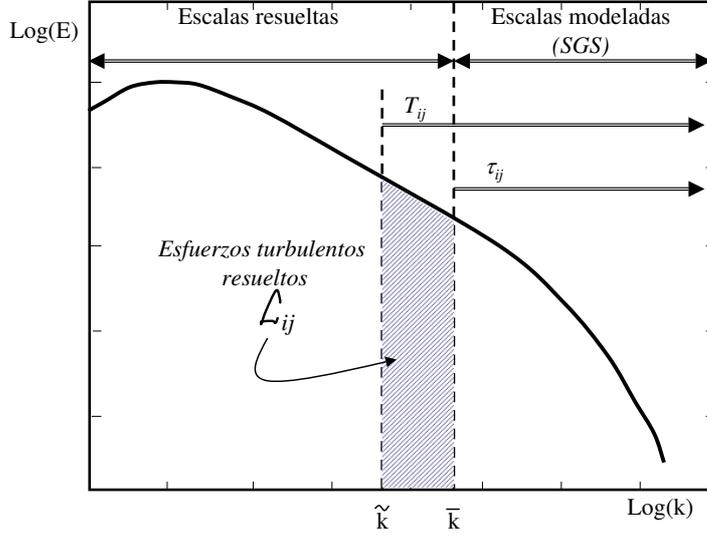


Fig. 3.3: Relación entre esfuerzos T_{ij}^s y esfuerzos asociados con la malla τ_{ij}^s . Eje vertical: energía cinética. Eje horizontal: numero de onda.

con $\overline{S_{ij}}$ para obtener una única ecuación para C :

$$C = \frac{\mathcal{L}_{ij}^d \overline{S_{ij}}}{2M_{ij} \overline{S_{ij}}}. \quad (3.50)$$

Este método es eficiente pero presenta problemas cuando $\overline{S_{ij}}$ se cancela [224]. Para remediar este problema, Lilly [133] propuso llegar a un único valor de C por el método de los mínimos cuadrados y elegir la solución, de las 5 ecuaciones para C , que minimice el error. El cuadrado del error sería:

$$Q = (\mathcal{L}_{ij}^d - 2CM_{ij})^2 \quad (3.51)$$

e imponiendo un error mínimo ($\frac{\partial Q}{\partial C} = 0$) se obtiene:

$$C = \frac{\mathcal{L}_{ij}^d M_{ij}}{2M_{ij} M_{ij}}. \quad (3.52)$$

Con cualquiera de los métodos para el cálculo de C , Ecuación (3.50) o (3.52), deben tenerse en cuenta los siguientes aspectos:

- C es variable en el espacio y en el tiempo. Aunque el ajuste de C por zonas puede evitar el uso de funciones damping cerca de paredes [202], cuando la variación es fuerte, se presenta una inconsistencia en el método (C inicialmente se ha supuesto constante, o lentamente variable, para extraerla de la operación de filtrado en la Ecuación (3.49)) [28].
- C puede tener valores negativos, por tanto el modelo puede tener localmente efectos anti disipativos. Esta característica frecuentemente se interpreta como transferencia de energía

en el sentido inverso o *backscatter* [224] y aunque puede resultar beneficioso para el método, sin embargo, también puede inducir problemas de inestabilidad numérica por lo que es común cancelar este efecto considerando sólo los valores positivos de C .

Para disminuir los problemas anteriores, se han propuesto varias modificaciones al modelo (ver por ejemplo [85, 149, 149, 204]).

El modelado dinámico es ampliamente utilizado en la actualidad; sin embargo, al ser un modelo de viscosidad turbulenta, el cálculo dinámico de C no mejora la correlación entre τ_{ij}^s y \bar{S}_{ij} del modelo de Smagorinsky [101, 202] y en muchas casos aumenta sensiblemente el coste computacional. Por tal motivo, el modelo de Smagorinsky, en su versión original, habitualmente es contemplado como primera opción³.

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

En el modelo de Smagorinsky, así como en sus distintas variantes, la viscosidad turbulenta ν_t se considera proporcional a una escala de longitud submalla Δ y a una velocidad turbulenta característica obtenida a partir del tensor velocidad de deformación como $|\bar{S}| = (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2}$. La función de este último parámetro es modelar o imitar la transferencia de energía desde las escalas resueltas a las escalas submalla, donde se disipa. Esta disipación resulta ser, por tanto, proporcional sólo a la parte simétrica del tensor gradiente de velocidad, introducida en una expresión para la viscosidad turbulenta. Sin embargo, por medio de *DNS* de turbulencia isótropa [287] se han detectado zonas en las cuales la vorticidad, ligada a la parte antisimétrica del tensor gradiente de velocidad, es dominante sobre los mecanismos irrotacionales o parte simétrica. El modelo de Smagorinsky es, por tanto, incapaz de predecir un comportamiento adecuado en estas zonas.

Un segundo inconveniente de los modelos en *LES*, ya mencionado anteriormente, es el comportamiento de la viscosidad turbulenta cerca de las paredes. Por su construcción, el modelo de Smagorinsky determina un valor de ν_t diferente de cero siempre que se detecten gradientes de velocidad, siendo necesario introducir en estas zonas una función *damping* para reducir o cancelar el efecto de ν_t . Sin embargo, en casos con geometrías complejas, el empleo de estas funciones puede ser una tarea complicada. Por otro lado, la función *damping* de van Driest, la más comúnmente usada, produce un comportamiento tal que $\nu_t = O(y^2)$ en lugar de $O(y^3)$, que es el propiamente correcto para ν_t . La alternativa para reducir la viscosidad cerca de las paredes es el modelado dinámico (sec. 3.6.2), logrando que $C_s \simeq 0$ cuando la intensidad de la turbulencia sea pequeña. Sin embargo, el procedimiento aumenta los requisitos computacionales y algunas veces puede desestabilizar el proceso de solución con las variaciones locales de C .

El modelo *WALE* [167] ha sido propuesto con la intención de remediar las dificultades que presenta el modelo de Smagorinsky. Su deducción está basada en el tensor gradiente de velocidad, considerando los efectos producidos tanto por la parte simétrica (deformación) como por la antisimétrica (rotación) de dicho tensor. Con ello, se pretende además determinar un comportamiento asintótico correcto (y^3) cerca de las paredes. En este modelo, la viscosidad turbulenta se calcula como:

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(\mathcal{S}_{ij}^d \mathcal{S}_{ij}^d)^{\frac{3}{2}}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{\frac{5}{2}} + (\mathcal{S}_{ij}^d \mathcal{S}_{ij}^d)^{\frac{5}{4}}}, \quad (3.53)$$

³Para un análisis más amplio de las características de estos modelos puede consultarse la referencia [224]

donde \mathcal{S}_{ij}^d se define como:

$$\mathcal{S}_{ij}^d = \frac{1}{2} (\bar{g}_{ij}^2 + \bar{g}_{ij}^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \bar{g}_{kk}^2, \quad (3.54)$$

con

$$\bar{g}_{ij} = \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}. \quad (3.55)$$

C_w es la constante del modelo cuyo valor es $C_w \approx 0.5$.

El modelo *WALE* se ha convertido en una opción alternativa al modelo de Smagorinsky, incluida la variante dinámica, dado su menor coste computacional y su fácil implementación tanto en mallas estructuradas como no estructuradas.

3.6.4. Modelo de una ecuación

Los modelos anteriormente considerados relacionan los esfuerzos τ_{ij}^s con el campo filtrado de velocidades \bar{u}_i en un mismo instante t y en los alrededores de una posición x_i . Es natural, por tanto, en analogía con las estrategias en *RANS*, buscar modelos que incorporen efectos históricos y globales del flujo a través de ecuaciones de transporte, bien para τ_{ij}^s o para alguna cantidad relacionada con las escalas residuales. En 1974, Deardorff [52] fue el primero en considerar en el modelado ecuaciones de transporte para los esfuerzos submalla o residuales; ecuaciones que son muy similares a las de los esfuerzos de Reynolds en *RANS*. Sin embargo, el coste computacional de tal procedimiento resultó ser excesivo. Posteriormente, algunos autores [233, 291, 95, 156] desarrollaron de manera independiente un modelo de viscosidad turbulenta basado en la energía cinética de las escalas residuales, en el cual,

$$\nu_t = C_\nu (k^s)^{\frac{1}{2}} \Delta, \quad (3.56)$$

donde k^s es la energía cinética de las escalas residuales ($k^s = \frac{1}{2} [\overline{u_k u_k} - \bar{u}_k \bar{u}_k]$), obtenida a partir de una ecuación de transporte que presenta la forma [244, 31, 285]:

$$\frac{\partial(\rho k^s)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j k^s)}{\partial x_j} = -\tau_{ij}^s \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \mathcal{D}^s + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \left(\frac{\nu}{Pr} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \left(\frac{\partial k^s}{\partial x_j} \right) \right]. \quad (3.57)$$

En la ecuación anterior, $\tau_{ij}^s \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$, representa el término de producción de grandes escalas⁴ y \mathcal{D}^s es la tasa de disipación de k^s , determinada como,

$$\mathcal{D}^s = C_\varepsilon \rho \frac{(k^s)^{\frac{3}{2}}}{\Delta}, \quad (3.58)$$

Los coeficientes C_ν en (3.56) y C_ε en (3.58) tienen que ser asignados *a priori* o determinados dinámicamente como parte de la solución [119]. Basados en deducciones analíticas y simulaciones recientes [31, 32, 244], en el presente trabajo se emplean los valores fijos $C_\nu=0.067$ y $C_\varepsilon=0.916$. Los esfuerzos submalla τ_{ij}^s son modelados con la expresión:

$$\tau_{ij}^s = -2\rho\nu_t \left(\bar{S}_{ij} - \frac{1}{3} \bar{S}_{kk} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{3} \rho k^s \delta_{ij}. \quad (3.59)$$

Una de las principales ventajas de este modelo con respecto al de Smagorinsky y sus variantes

⁴Cuando la hipótesis de equilibrio es usada, como por ejemplo en el modelo de Smagorinsky, todos los demás términos de la Ecuación (3.57) se cancelan y la producción de k^s es igual su disipación [189]

es la capacidad que posee de capturar el efecto del desequilibrio entre la producción y la disipación de la energía cinética en las escalas residuales, efecto que reside en la escala de velocidad empleada para este modelado. Esto es particularmente importante en la simulación de flujos a altos números de Reynolds empleando mallas con un número de celdas relativamente reducido [150, 244, 176].

3.7. Modelado estructural

En este apartado se describen brevemente algunas de las opciones para el cierre de las ecuaciones filtradas de Navier-Stokes que ofrece el modelado estructural. Este tipo de modelos, a diferencia de los de viscosidad turbulenta, son formulados sin considerar el tipo de interacción entre el campo resuelto y las escalas filtradas [224]; se basan en establecer aproximaciones para τ_{ij}^s a través de la reconstrucción de la velocidad total (sin filtrar) $u_i = \bar{u}_i + u'_i$ partiendo del campo resuelto \bar{u}_i . Estos modelos pueden ser agrupados en las siguientes categorías [224]:

- Modelos formulados matemáticamente a partir de expansiones en series de varios de los términos que aparecen en las ecuaciones filtradas de Navier-Stokes. Se basan en el principio de que si la función de filtrado G es invertible, es posible aplicar la función inversa al filtrado G^{-1} a \bar{u}_i (ver por ejemplo [78, 135]).
- Modelos basados en ecuaciones de transporte para las componentes de tensor τ_{ij}^s . Estos modelos suelen ser muy complejos debido a los términos desconocidos que aparecen en las nuevas ecuaciones de transporte y que tienen que ser evaluados. Este procedimiento, inicialmente propuesto por Deardoff [51] y posteriormente retomado por Fureby *et al.* [76], es análogo al modelado de las ecuaciones para los esfuerzos de Reynolds en *RANS*.
- Modelos construidos a partir de las estructuras submalla. Suponen que las direcciones predominantes de los alineamientos son algo conocido para las estructuras filtradas y que estas pueden ser representadas a través de vórtices cuya orientación es gobernada por las escalas resueltas [154].
- Modelos basados en la suposición de la similitud de escalas, es decir, en la semejanza entre las mayores escalas no resueltas y las menores escalas resueltas. La hipótesis principal es que las interacciones más importantes entre las fluctuaciones de grande y pequeña escala tienen lugar precisamente en ese rango, entre las escalas de tamaño cercano al filtro [6]. En esta clasificación también se consideran los modelos mixtos (combinación de modelado estructural y funcional), por ejemplo, el modelo de Smagorinsky-Bardina [7].
- Modelos basados en la reconstrucción explícita de las fluctuaciones de la velocidad submalla. Numéricamente, esto se hace aplicando un filtrado de mayor resolución por medio de una malla auxiliar (o una serie de mallas auxiliares) más densas que la malla original. El campo submalla u' es evaluado sobre la malla auxiliar a través de modelos (ver por ej. [56, 160, 234]).
- Modelos basados en algoritmos numéricos específicos cuyo objetivo es reproducir directamente los términos submalla que aparecen en la ecuación de cantidad de movimiento y no el tensor de esfuerzos. Ocupan esta clasificación los modelos del promediado local de Denaro [53, 250], el procedimiento de deconvolución aproximada [253, 254] y el modelo de las escalas residuales [147].

3.8. Formulaciones espectrales

En la teoría sobre turbulencia es común encontrar la transformada de Fourier para los componentes de la velocidad:

$$\hat{u}_i(\vec{k}) = \int u_i(\vec{x}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} d\vec{x}, \quad (3.60)$$

o más frecuentemente, el cuadrado de su amplitud, el espectro de energía:

$$E(k) = \frac{1}{2} \int u_i(\vec{k}) u_i^*(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (3.61)$$

donde la integral es sobre todos los vectores \vec{k} en una esfera de radio k . El uso de una representación espectral del campo de velocidad implica que estas teorías sólo son aplicables a turbulencia homogénea e isotrópica [69]. De la transformada de Fourier de las ecuaciones de Navier-Stokes es posible deducir una ecuación para el espectro de energía, donde el término viscoso es responsable de la disipación:

$$\epsilon(k) = 2\nu k^2 E(k). \quad (3.62)$$

De la teoría sobre la turbulencia [129] es posible definir una viscosidad espectral turbulenta:

$$\nu_t = \frac{T_{>}(k)}{2k^2 E(k)}, \quad (3.63)$$

donde $T_{>}(k)$ es la energía transferida a partir de un determinado número de onda k a números de onda por encima del *cutoff*⁵.

3.9. Conclusiones

En este capítulo se han presentado la técnica de la Simulación de las Grandes Escalas para flujos turbulentos no reactivos. Se ha comenzado analizando los requisitos computacionales y las necesidades de simulación de un flujo turbulento. A partir del concepto de la cascada de energía, se define la separación energética de las escalas dentro del subrango inercial del espectro de energía. En *LES*, las grandes escalas son capturadas directamente por la malla; las pequeñas escalas que están por debajo de la resolución de la malla tienen que ser modeladas. Esta separación de escalas se realiza aplicando una operación de filtrado a las ecuaciones que describen la dinámica de un flujo turbulento. Las ecuaciones filtradas, matemáticamente similares a las producidas en *RANS*, presentan términos que necesitan modelarse para cerrar el sistema. De acuerdo a la clasificación del tipo de modelado, se hace hincapié en el modelado funcional a través de una viscosidad turbulenta, describiendo las opciones más habituales en aplicaciones prácticas.

Al margen de los avances en el modelado submalla y de la aparición de nuevos modelos, el correcto diseño de la malla en *LES* es un factor importante a considerar. Algunos autores afirman que es posible obtener resultados virtualmente independientes de los detalles del modelo submalla asegurando que el número de onda de la escala de filtrado este dentro del subrango inercial [77], consiguiendo que las diferencias entre modelos sean del mismo orden (o menores) que las que se pueden atribuir al cambio o resolución en la malla⁶ [243].

⁵Más detalles sobre este tipo de modelos pueden ser encontrados en [129].

⁶Para una descripción más detallada de los fundamentos, alcances y limitaciones de *LES*, en el caso de flujos

Capítulo 4

Simulación de las Grandes Escalas de flujos turbulentos reactivos

La mayoría de los métodos actuales para determinar el comportamiento y las propiedades de los flujos turbulentos reactivos, principalmente en sistemas de combustión prácticos, están basados en el uso de ecuaciones promediadas (*RANS*) y modelos estadísticos tanto para la turbulencia como para la reacción química y sus interacciones [104]. Estas técnicas han mostrado ser útiles en múltiples aplicaciones; sin embargo, poseen algunas limitaciones en cuanto a la reproducción de varios efectos presentes en la mayoría de estos sistemas, principalmente los asociados a estructuras transitorias del flujo. *LES* representa una técnica alternativa que soluciona muchas de estas limitaciones, ofreciendo además un mayor grado de realismo en las predicciones al capturar la mayor parte de las escalas del movimiento del flujo. Al modelarse solo las escalas submalla, los modelos tienen un impacto menor en las predicciones globales de un flujo turbulento. Sin embargo, en lo que respecta al fenómeno de combustión, éste se desarrolla en escalas que habitualmente son mucho más pequeñas que las capturadas por la resolución de la malla y, por tanto, de la escala de filtrado. En *LES*, de manera análoga a *RANS*, se requiere modelar el proceso reactivo. Por esta razón, muchos de los problemas asociados con la aplicación de *LES* a llamas turbulentas son similares a los que se encuentran en *RANS*, lo que origina que gran parte de las técnicas de modelado para los términos no cerrados de las ecuaciones de transporte sean aplicables para ambas técnicas. En este capítulo se presenta el filtrado de las ecuaciones que complementan el sistema presentado en el capítulo anterior para simular un flujo turbulento reactivo. Además, se se mencionan brevemente las técnicas que se pueden emplear para este tipo de flujos en el ámbito de *LES* señalando algunas de sus principales ventajas y desventajas desde el punto de vista numérico y detallando las empleadas en esta tesis.

4.1. Ecuaciones filtradas de conservación de las especies químicas

Similar al filtrado de las ecuaciones de Navier-Stokes, es posible aplicar la operación de filtrado como una integral de convolución para los escalares presentes en el sistema:

$$\bar{Y}_\alpha(\vec{x}, t) = \int_{\Omega} G(\vec{x}, \vec{x}') Y_\alpha(\vec{x}') d\vec{x}'. \quad (4.1)$$

En el Capítulo 3 se han presentado las ecuaciones filtradas y modelos de cierre para sistemas con flujos turbulentos no reactivos donde la densidad es constante. Sin embargo, cuando en flujo hay un proceso de combustión, se libera calor que provoca un incremento en la temperatura e induce nuevas inestabilidades (más turbulencia) que, al mismo tiempo, aceleran el proceso de reacción química [185]. Otro factor a tener en cuenta son las posibles fluctuaciones de la presión que podrían complicar aún más el fenómeno; sin embargo, frecuentemente se supone que, si el número de Mach es pequeño, como en las llamas analizadas en esta tesis, las fluctuaciones de presión son despreciables, lo que lleva a clasificar estos sistemas como incompresibles o “débilmente compresibles” [103] al considerar los cambios en la densidad del fluido como función principalmente de la temperatura y de la composición química.

El proceso considerado es, por tanto, altamente sensible a los cambios en la temperatura, producto de las reacciones de combustión, que, combinadas a la naturaleza propia de la turbulencia, inducen fluctuaciones en la densidad que podrían complicar el filtrado de las ecuaciones al incluir correlaciones con fluctuaciones de esta variable. Una alternativa es la introducción del filtrado de Favre¹ [67] que pondera cantidades con la densidad; generalmente es denotado por una tilde ($\tilde{}$) y definido como:

$$\tilde{f} = (\vec{x}, t) = \frac{\bar{\rho} f}{\bar{\rho}}. \quad (4.2)$$

La aplicación del filtrado de Favre a la Ecuación (2.8) para las especies químicas presentada en el Capítulo 2 da origen a la ecuación:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right) + \tilde{S}_\alpha. \quad (4.3)$$

Al igual que ocurre con las ecuaciones para las grandes escalas del campo de velocidad, la operación de filtrado sobre los términos no lineales introduce correlaciones, *a priori*, desconocidas. En el caso de la Ecuación (4.3) los términos que precisan de cierre son dos: el término de transporte convectivo $\tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha$ y el término fuente de reacción química \tilde{S}_α . Para ambos es necesario el uso de estrategias de modelado para representar sus efectos a través de expresiones en función de las variables filtradas del sistema \tilde{u}_i y \tilde{Y}_α .

4.1.1. Modelado del término convectivo

En el caso del término convectivo no lineal, la estrategia adoptada es la misma que en el caso de las ecuaciones de cantidad de movimiento: separar el término en convección resuelta, dependiente

¹Operación análoga al promediado de Favre en *RANS*

únicamente de las grandes escalas, y en no resuelta que represente el efecto de las escalas pequeñas o residuales:

$$\overline{\rho u_i \widetilde{Y}_\alpha} = \overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_\alpha + \Psi_{i\alpha}^s. \quad (4.4)$$

$\Psi_{i\alpha}^s$ es el término convectivo de las escalas residuales, definido como $\Psi_{i\alpha}^s = \overline{\rho u_i \widetilde{Y}_\alpha} - \overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_\alpha$; representa las fluctuaciones submalla de las fracciones másicas de la especie α . Sustituyendo (4.4) en (4.3), la ecuación filtrada para las especies químicas queda:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{S_c} \frac{\partial \widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right) + \widetilde{S}_\alpha - \frac{\partial \Psi_{i\alpha}^s}{\partial x_i}. \quad (4.5)$$

Para modelar $\Psi_{i\alpha}^s$ es común adaptar modelos submalla empleados en flujos no reactivos, basados en la hipótesis de la difusión por gradiente, a través de la definición de una difusividad turbulenta. A pesar de que se han detectado situaciones en las que su empleo es cuestionado, principalmente cuando existe difusión en sentido contrario al gradiente (*counter-gradient diffusion*) [268, 260], esta estrategia se utiliza frecuentemente debido, entre otros factores, a su fácil implementación, bajo coste computacional y al respaldo de predicciones validadas con datos experimentales (por ejemplo en [206]). Análogamente al proceso seguido en las ecuaciones de cantidad de movimiento, empleando esta hipótesis, el término sería modelado como:

$$\Psi_{i\alpha}^s = -\Gamma_t \frac{\partial \widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_i}, \quad (4.6)$$

donde

$$\Gamma_t = \frac{\mu_t}{S_{c_t}}, \quad (4.7)$$

con lo que la Ecuación (4.5) quedaría:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \right) \frac{\partial \widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} \right] + \widetilde{S}_\alpha. \quad (4.8)$$

En la expresión anterior, μ_t representa la viscosidad turbulenta, determinada mediante alguno de los modelos descritos en el Capítulo 3; S_{c_t} es el número de Schmidt turbulento que, al estar empleando para $\Psi_{i\alpha}^s$ la mismas escalas de longitud y velocidad que en el modelado de los esfuerzos τ_{ij}^s , debe ser del mismo orden de magnitud que el número de Schmidt, S_c , molecular [23].

Existen otros procedimientos que evitan la hipótesis de la difusión por gradiente; por ejemplo, el uso de ecuaciones de transporte para los flujos submalla $\Psi_{i\alpha}^s$ y relaciones basadas en la semejanza de escalas [260]. Otra opción es la propuesta por Menon *et al.* [237] en la implementación de *Linear Eddy Model* como modelo submalla. Sin embargo, como se verá en esta tesis, el uso de esta técnica incrementa sensiblemente la complejidad del modelado y el coste computacional.

4.1.2. Modelado del término de reacción química

El modelado de la reacción de combustión es una de las principales dificultades que se presentan en la simulación de flujos turbulentos reactivos. La tasa de reacción química es altamente no lineal, por lo que no puede calcularse simplemente a partir de las variables medias del sistema en el caso

de simulaciones mediante *RANS*, o filtradas en el de *LES*. Matemáticamente,

$$\overline{S_\alpha(Y_\alpha)} \neq S_\alpha(\overline{Y_\alpha}). \quad (4.9)$$

Las estrategias adoptadas para tratar este problema generalmente provienen de adaptaciones de métodos empleados en *RANS* [100] y habitualmente se conocen como “modelos de combustión” (ver Sección 4.4).

4.2. Ecuación filtrada para la entalpía

A fin de tener el sistema completo de ecuaciones filtradas, en este apartado se presenta brevemente el filtrado de la Ecuación (2.18) de conservación de la entalpía. Recurriendo al filtrado de Favre definido anteriormente y considerando únicamente la difusión de calor dada por la ley de Fourier así como la pérdida de calor por radiación, la ecuación filtrada tiene la forma:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k}{C_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \tilde{q}_{rj}}{\partial x_j}. \quad (4.10)$$

Nuevamente se presenta el problema de la correlación de variables en el término convectivo. La solución, de igual manera, consiste en separar el término en una parte resuelta de grandes escalas y en una residual que requiere de modelado:

$$\tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h} = \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h} + \Theta_i^s, \quad (4.11)$$

donde la porción no resuelta Θ_i^s , que representa el flujo de calor submalla, es posible modelarla como [152, 244]:

$$\Theta_j^s = \frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j}. \quad (4.12)$$

Sustituyendo (4.11) y (4.12) en la Ecuación (4.10) se tiene:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{k}{C_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \right] - \frac{\partial \tilde{q}_{rj}}{\partial x_j}. \quad (4.13)$$

Para el flujo de calor por radiación, en caso de ser considerado, se pueden emplear procedimientos similares a los habituales en *RANS* (ver por ejemplo [180, 293]).

En el Capítulo 2 se ha establecido que, bajo ciertas hipótesis, la ecuación de la entalpía total (térmica + química) puede reemplazarse por una ecuación diferencial homogénea (sin términos fuente) para la fracción de mezcla. Este tratamiento, conocido frecuentemente en la literatura como “método del escalar conservado”, es un procedimiento muy común tanto en *RANS* como en *LES* y es utilizado en algunas simulaciones de esta tesis.

4.3. Ecuación filtrada para la fracción de mezcla

El filtrado de la ecuación para ξ es similar al filtrado de las ecuaciones para las especies químicas, pero al carecer de término fuente, el único término que requiere de modelado es el término

convectivo:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{\xi})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right). \quad (4.14)$$

Descomponiendo el término en dos partes, una dependiente de las grandes escalas y otra de las escalas residuales, se tiene:

$$\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\xi} = \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\xi} + \Psi_\xi^s, \quad (4.15)$$

con lo que parte residual Ψ_ξ^s resulta ser:

$$\Psi_\xi^s = \bar{\rho} \tilde{\xi} \tilde{u}_i - \bar{\rho} \tilde{\xi} \tilde{u}_i. \quad (4.16)$$

Empleando la hipótesis de difusión por gradiente e introduciendo una difusividad turbulenta, $D_t = \mu_t / Sc_t$ [230], se tiene que,

$$\Psi_\xi^s = \frac{\mu_t}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right). \quad (4.17)$$

De este modo, la ecuación filtrada para la fracción de mezcla puede escribirse como:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{\xi})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right]. \quad (4.18)$$

En el caso de Sc_t , es posible emplear formulaciones dinámicas para determinar localmente su valor (por ejemplo [159, 23]). Sin embargo, mediante estos mismos procedimientos, se ha observado que Sc_t se mantiene próximo a 0.4, por lo que este valor constituye en muchos casos una buena aproximación para todo el dominio [100, 196, 23, 229].

4.4. Modelos de combustión

En los últimos años, dado el avance en la potencia de los equipos de cálculo, la aplicación de *LES* en la simulación de flujo turbulentos se ha incrementado notablemente. Al margen de las ventajas de *LES* sobre *RANS*, en cualquiera de las dos técnicas la combustión ocurre en escalas que no son capturadas por la malla. Muchos de los modelos de combustión ampliamente validados en *RANS* han sido adaptados a *LES* y es común que en la literatura especializada no se realice una distinción explícita para esta última. Entre los factores que han motivado el uso de *LES* en flujos con combustión se encuentra la posibilidad de capturar en las simulaciones efectos importantes que generalmente *RANS* no reproduce, particularmente las estructuras turbulentas no estacionarias y fuertes curvaturas en líneas de corriente del flujo [54] que pueden ser determinantes para la predicción de estos sistemas.

En este apartado se presentan los modelos y estrategias empleadas en esta tesis, junto con otras alternativas, para describir la combustión en el flujo turbulento.

4.4.1. Clasificación de los sistemas de combustión

Para la descripción matemática y modelización de un flujo con combustión, es frecuente clasificar las configuraciones de acuerdo al estado inicial de la mezcla de los reactivos:

- Sistema no-premezclado (también llamados “de difusión”): los reactantes son aportados de forma segregada. La reacción se lleva a cabo en la capa de mezcla entre ambos reactantes, alrededor del lugar geométrico donde se encuentran en proporción estequiométrica.
- Sistema premezclado: los reactantes entran completamente mezclados a la zona de reacción. Las regiones de reactantes y productos están separadas por la zona de reacción. Para evitar que la reacción se propague aguas arriba, hacia la zona de reactantes frescos (efecto *flashback*), la velocidad de inyección de los reactantes debe ser superior a la velocidad de propagación de la llama. También, es común utilizar un cuerpo romo que estabilice la reacción.
- Sistema parcialmente premezclado: sistema intermedio en el que los reactantes entran parcialmente premezclados a la zona de reacción, pero uno de ellos es aportado en una cantidad adicional (y necesaria para la combustión completa) con posterioridad.

Otros aspectos a considerar en la caracterización de los sistemas de combustión son el régimen del flujo, laminar o turbulento, y la fase termodinámica en la que se encuentren los reactantes en la entrada a la zona de reacción. Si ambos están en la misma fase, la combustión se llama homogénea y si están a distinta fase, se denomina heterogénea.

En esta tesis, las llamas turbulentas que se analizan son sistemas del tipo no premezclado, en donde, además, los reactantes se encuentran en fase gaseosa.

4.4.2. Clasificación de modelos de combustión

Los ingredientes básicos para describir las llamas turbulentas se deducen a partir de los análisis en llamas laminares. Frecuentemente se emplea la fracción de mezcla, ξ , en llamas de difusión ($\xi=0$ corresponde al oxidante y $\xi=1$ a combustible) y una variable que indique el grado de reacción, c , en llamas premezcladas ($c=0$ en los gases frescos y $c=1$ en los quemados). Así, por ejemplo, la posición de una llama premezclada se quedaría definida en la zonas que corresponde a valores de c entre 0 y 1 y en la regiones próximas a $\xi=\xi_{st}$, la condición estequiométrica (ver Figura 4.1).

Las principales estrategias para modelado de la combustión turbulenta pueden agruparse en tres categorías [267, 87, 263]:

1. Modelos basados en la intensidad del mezclado turbulento; es decir, cuando la tasa de reacción es limitada por el mezclado turbulento, descrito en términos de la tasa de disipación de los escalares. Esto ocurre cuando se supone que el número de Damköhler, $Da = \tau_L/\tau_c$, que compara los tiempos característicos de la turbulencia (τ_L) y de la química (τ_c), es grande. En las pequeñas escalas del flujo, la tasa de disipación de las especies controla el mezclado de los reactantes y por tanto, juega un papel dominante en el modelado de la combustión [24].
2. Modelos basados en el análisis geométrico del frente de llama. Son conocidos como modelos tipo “flamelet” ya que consideran el frente de llama como una superficie geométrica (flamelet) o lámina cuyo espesor es más delgado que cualquier otra escala del flujo. Esta isosuperficie de llama se establece en función del valor de los escalares ξ o c , por ejemplo, donde $\xi = \xi_{st}$ (ver Figura 4.1). El análisis del flujo reactivo se realiza en función de coordenadas locales referidas al frente de reacción.

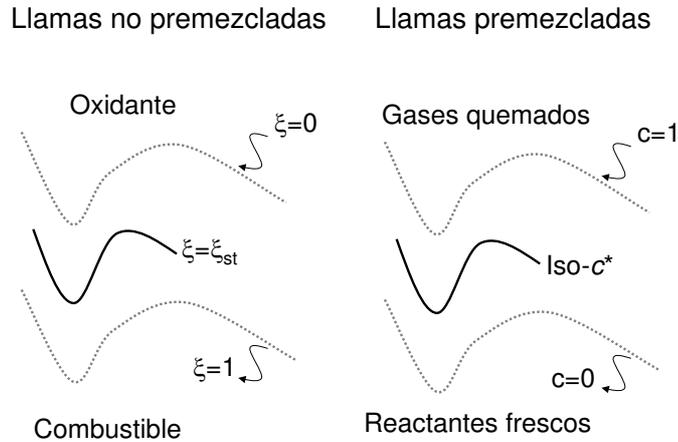


Fig. 4.1: Estructura geométrica en las llamas premezclada y no premezclada

- Modelos basados en la determinación en cada punto del flujo de las propiedades estadísticas de los campos de escalares. Los momentos de un escalar, como la media y la varianza, pueden ser obtenidos a partir de las funciones de densidad de probabilidad (*PDF*) [59, 199, 202]. El análisis muchas veces también está ligado al frente de reacción [251, 27]. Los procesos difusivos son representados a través de modelos de micro-mezcla independientes de las reacciones químicas [87, 263].

Otra clasificación frecuente de los modelos de combustión se realiza en función del sistema donde se pueden emplear, premezclado o no premezclado, y en la forma de considerar la química y el mezclado turbulento (química rápida o lenta). En la Tabla 4.1 puede verse de manera simplificada esta clasificación.

4.4.3. Interacción química-turbulencia

El modelado adecuado de las interacciones entre la química y la turbulencia es de gran importancia en la correcta representación de fenómenos como la ignición, extinción y formación de contaminantes, así como de la predicción de la estructura, propagación y estabilización de las llamas turbulentas. Como se ha mencionado, es frecuente clasificar los regímenes de estas interacciones comparando las escalas características de tiempo y longitud de la turbulencia y la combustión; es posible construir diagramas para los distintos regímenes de combustión en función de parámetros que dependen directamente de estas escalas [185, 198, 267, 100].

En el caso de la reacción química no premezclada, el tipo de sistemas analizados en esta tesis, los distintos regímenes pueden clasificarse con ayuda de un diagrama que tenga por ejes los números de Damköler y Reynolds, Da_L y Re_t , definidos en la Sección 2.1. En la Figura 4.2, las líneas de Da_L y Re_t constante son paralelas a los ejes, mientras que las líneas de Da_η son rectas de pendiente 1/2 con respecto al eje $\ln(Re_t)$. La línea de $Da_\eta=1$ pasa por el punto (0,0) del diagrama. El flujo turbulento está en el diagrama a la derecha de la línea $Re_t=1$; sobre esta línea, la relevancia del transporte

Tabla 4.1: Clasificación de los modelos de combustión en términos de la química y el mezclado (adaptada de [185])

	Combustión premezclada	Combustión no premezclada
Química rápida	Modelo Bray-Moss-Libby (<i>BML model</i>) [25]	Modelo de equilibrio químico y una ecuación para ξ
	<i>CFM (Coherent Flame Model)</i> [61, 91]	[23]
	<i>EBU (Eddy Break Up)</i> [75] <i>EDM (Eddy Dissipation Model)</i> [289, 163, 87]	
Química finita (lenta)	Ecuación de transporte para la PDF [199, 59, 40, 30]	
	Modelos de flamelet basados en una ecuación para G (<i>The Level Set Approach</i>) [283, 99, 195]	Modelos de flamelet basados en la fracción de mezcla ξ [43, 42, 196]
	<i>Conditional Moment Closure</i> [121, 13, 122]	
	<i>Linear Eddy Model</i> [113, 114, 115, 116, 244] <i>One-Dimensional Turbulence</i> [117]	

turbulento y molecular son comparables. El intervalo que va de $Re_t=1$ a $Re_t=Re_t^*$ (un cierto Reynolds crítico) representa el dominio de las zonas de reacción laminares embebidas en el flujo turbulento o “flamelets”. Para $\tau_\eta > \tau_c$, estas llamas son “arrugadas” por los torbellinos turbulentos en escalas del mismo orden que la de Kolmogorov. Para tiempos químicos mayores ($\tau_c > \tau_\eta$, es decir, la zona entre las líneas $Da_L=1$ y $Da_\eta=1$ del diagrama) la reacción no es suficientemente rápida y la turbulencia puede estirar la zona de reacción (“*flame stretching*”) aumentando los gradientes y la difusión de temperatura y especies desde el frente de reacción, pudiendo haber extinción local en la llama. Para Re_t altos (mayores que un cierto Re_t^*) no es posible distinguir flamelets en el flujo. En el límite de pequeños τ_c (altos Da_L), la mezcla y la reacción son rápidas, por lo que se encuentra en la zona de equilibrio químico (esquina superior derecha del diagrama). Para $Da < 1$ y Re altos, la reacción química es lenta y la mezcla asegurada por la difusión a alto Re hace que la llama sea generalmente estable (no fluctúa) y ancha, por lo que su comportamiento suele denominarse pseudo-laminar.

Hipótesis de química rápida

Para llamas no premezcladas, los modelos de química rápida representan generalmente el límite extremo al suponer que la combustión se lleva a cabo, en forma instantánea, al mezclarse los reactivos², por efecto de la turbulencia. Estos modelos se pueden implementar fácilmente suponiendo de antemano una forma para la PDF (generalmente una función β) de la fracción de mezcla ξ ,

²Los modelos que emplean esta hipótesis suelen referirse como del tipo “*mixed-is-burnt*”.

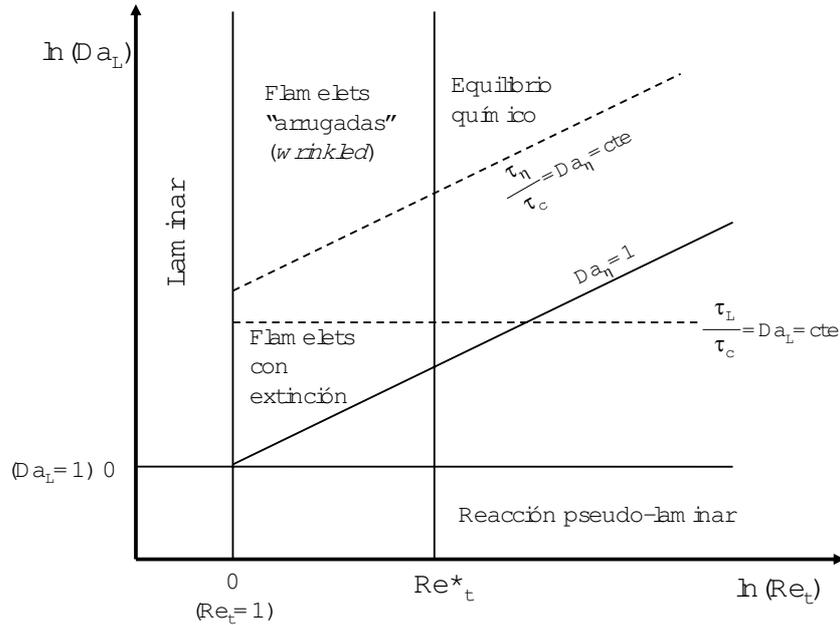


Fig. 4.2: Diagrama para la clasificación de la reacción química en sistemas turbulentos no premezclados

construida a partir del valor filtrado $\tilde{\xi}$ y su varianza ξ_v^2 . Las propiedades termoquímicas son funciones de ξ y por tanto, determinadas mediante la integración de la *PDF* con los valores filtrados. Es común generar una tabla de los estados termoquímicos previo a la simulación y evitar durante ésta las integraciones repetitivas, con lo que se consigue una implementación más eficiente [23].

Modelos *Eddy Break Up (EBU)* y *Eddy Dissipation Model (EDM)*

El modelo *EBU* [248] es un método práctico que proporciona el cierre para el término de reacción química. Se basa en que el mezclado turbulento puede considerarse como un proceso en cascada a partir de la escala integral hasta las escalas a nivel molecular. Considera que este proceso de mezclado controla la tasa de reacción química, por lo que cierra su cálculo con parámetros del mezclado turbulento y no propiamente de la cinética química. Después de su formulación, ha sido ligeramente modificado, dando lugar al *Eddy Dissipation Model* [142] que condiciona la tasa de reacción a la presencia o valor mínimo de combustible, oxidante o productos y a una escala de tiempo turbulento ³ (τ) eliminando la influencia de la cinética química y representando la hipótesis de química rápida. Algunas formulaciones consideran también la cinética química condicionando la tasa de reacción al valor mínimo entre la tasa por mezclado turbulento y la proporcionada por la cinética química, expresada generalmente en función de una velocidad de Arrhenius (ver por ejemplo [289, 163]). Sin embargo, incluir una cinética química realista, frecuentemente encarece el coste de la simulación. En contraparte a la relativa simplicidad en la implementación de estos modelos, se requiere un mayor análisis para determinar en que regímenes y hasta que punto es válido aplicar este tipo de modelos en *LES* [35].

³Típicamente, en *RANS* $\tau = k/\varepsilon$, donde k y ε son la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación respectivamente; en *LES*, $\tau = (2S_{ij}S_{ij})^{\frac{1}{2}}$ aunque otras formulaciones son posibles (ver por ejemplo [289]).

Régimen de flamelets estacionarios

Un primer paso para considerar formalmente las velocidades de reacción, dadas por la química, consiste en considerar la llama constituida de láminas (flamelets) laminares reactivos, más delgadas que la escala más pequeña del flujo (típicamente, la escala de Kolmogorov, η) y moldeadas por el flujo turbulento. Asimismo, se supone que la química alcanza un estado estacionario en cada posición del dominio de análisis [184]. Por tanto, la llama turbulenta puede representarse por un conjunto de flamelets en estado estacionario. Esta técnica es empleada en esta tesis y se describe con detalle en la Sección 4.5.

Régimen de flamelets transitorios

Dada la naturaleza altamente transitoria de algunos fenómenos como la ignición o la extinción en llamas turbulentas, el siguiente paso en el modelado de las interacciones entre la química y la turbulencia es incluir los efectos transitorios en los modelos de flamelets. Ello implica resolver las ecuaciones de flamelets transitorias (ver Sección 4.5) para cada punto de la llama y evaluar entonces las propiedades termoquímicas por la doble integración de las *PDFs*. En la práctica, resolver la formulación transitoria de flamelets, su posterior integración y acoplado a *LES*, resulta ser un proceso demasiado costoso en tiempo de cómputo. Por tanto, en términos generales, esta opción no es atractiva para simulaciones prácticas; por el contrario, representa un campo de investigación en métodos que permitan optimizar su implementación a *LES*. Un ejemplo de ello es la deducción de una formulación transitoria lagrangiana de las ecuaciones de flamelets para ser acopladas en *LES* [196, 192]. Otras alternativas propuestas para incluir los efectos transitorios en los flamelets pueden consultarse en [45, 211].

Conditional Moment Closure, CMC

Esta estrategia se basa en la hipótesis de que la mayoría de las fluctuaciones de los escalares reactivos son función de la fluctuación en la composición de la mezcla, descrita, asimismo, por las fluctuaciones de ξ . Este modelo, desarrollado independientemente por Klimenko [121] y Bilger [13], ha sido inicialmente propuesto para el análisis de llamas no premezcladas; posteriormente, estos mismos autores han propuesto su extensión para sistemas premezclados [122]. A diferencia de los modelos de flamelets, este modelo considera las estadísticas o momentos condicionados en una posición fija \vec{x} y a un tiempo t del flujo para deducir, primero, un conjunto de ecuaciones promediadas para las especies y temperatura. En estas ecuaciones hay varios términos que necesitan cierre: el transporte turbulento, la tasa de disipación y el término promediado de reacción química. Este último se considera dependiente únicamente de los valores medios condicionados. Es posible emplear momentos de orden mayor que uno en la aproximación *CMC*; sin embargo crece proporcionalmente la dificultad de cerrar los nuevos términos generados. Esta estrategia posee características similares a la formulación transitoria de flamelets y, al igual que ésta, requiere de avances en las técnicas de implementación y equipo de cómputo para ser una opción atractiva en *LES* de casos prácticos.

Métodos de Función de Densidad de Probabilidad conjunta (*PDF*)

Los métodos de la *PDF* conjunta de los escalares han sido ampliamente desarrollados durante los últimos años, principalmente para su aplicación con *RANS* [199, 59]. Estos métodos han demostrado ser capaces de modelar flujos con fuertes interacciones entre química y turbulencia, por ejemplo, en los fenómenos de extinción e ignición. En términos generales, estos métodos se basan en la formulación de una ecuación de transporte para la *PDF*. Desde un punto de vista numérico, la característica más peculiar de esta ecuación es su alta dimensionalidad. Habitualmente, esta ecuación se resuelve mediante la técnica de simulación de Monte Carlo [199] que hace uso de un conjunto de partículas estocásticas para simular los fenómenos de convección, difusión molecular, difusión turbulenta y reacción química. Dada la característica estocástica del método, el error numérico de la simulación depende del número total de partículas empleadas en cada celda⁴, que debe ser adecuado para obtener la precisión requerida. Uno de los aspectos de mayor relevancia de los métodos de la *PDF* es el modelado de la mezcla molecular, para el se han desarrollado diversas estrategias [199, 59, 40].

Linear Eddy Model (*LEM*)

Esta estrategia ha sido formulada originalmente por Kerstein como modelo para la simulación global del mezclado turbulento [113, 114] y la predicción de las complejas interacciones entre la química y la turbulencia [115, 116]. En el ámbito de *LES*, *LEM* se puede emplear para modelar los procesos de mezcla y reacción química en las escala submalla mediante ecuaciones de reacción-difusión y procesos estocásticos que alteran la distribución espacial del campo escalar en un dominio unidimensional inmerso en cada celda. Los términos de reacción química y mezcla molecular se tratan forma exacta, sin ningún tipo de cierre, ya que la discretización del dominio submalla resuelve el rango de escalas entre el filtro de *LES* y la escala más pequeña del flujo. En esta tesis se ha empleado este modelo. En las secciones posteriores se describen los detalles de su formulación y acoplamiento con *LES*.

Las ideas del modelado empleadas en *LEM* han sido extendidas para incluir también la descripción unidimensional turbulenta del campo de velocidades. Este procedimiento, denominado *ODT* (*One-Dimensional Turbulence*) [117, 63], a diferencia de otros modelos de turbulencia, no recurre a la hipótesis de Kolmogorov sobre la cascada de energía en su formulación, pero ha mostrado reproducir este fenómeno adecuadamente. Actualmente se considera que tanto *LEM* como *ODT* representan quizá los modelos más sofisticados para la interacción química-turbulencia [32]

4.5. Concepto de flamelet laminar

El concepto de flamelet laminar es aplicable a un régimen en la combustión turbulenta donde las reacciones químicas, comparadas con otros procesos de transporte, se producen a un ritmo tal que ocurren en láminas asintóticamente delgadas en un flujo turbulento que podría considerarse no reactivo. Estas láminas son llamadas “flamelets laminares” [184, 185]. Esta forma de visualizar una llama turbulenta como un conjunto flamelets laminares, introducida en 1975 por Williams [281], originó la idea de emplear perfiles obtenidos de llamas laminares para calcular las propiedades medias y sus fluctuaciones en llamas turbulentas [130].

⁴El error estadístico de la técnica de Monte Carlo disminuye en proporción $1/\sqrt{N_{pc}}$, donde N_{pc} es el número de partículas por celda [185].

Cuando la escala de tiempo que determina la tasa de reacción de un combustible (τ_c) es pequeña comparada con las escalas de tiempo de la difusión y convección del flujo (τ_η y τ_L , respectivamente), la combustión se lleva a cabo en capas o láminas asintóticamente delgadas (llamadas generalmente capas internas, en inglés, *inner layers* o *fuel consumption layers* [185]) moldeadas por el flujo turbulento. Si esta capa es aún más delgada que los torbellinos más pequeños del flujo, determinados por la escala de Kolmogorov η , puede considerarse que el comportamiento del proceso de reacción química es similar al que se estaría desarrollando dentro de un flujo laminar; bajo estas circunstancias, la hipótesis de flamelets laminares estaría plenamente justificada. Si por el contrario, la turbulencia es tan intensa que η es más pequeña que el espesor de los flamelets, éstos son penetrados y su estructura es destruida. En este caso es probable alcanzar la extinción de la llama [185]. Así pues, para que la reacción tenga lugar en forma de flamelets, es necesario que el número de Damköhler Da_L sea alto (ver figura 4.2); para Da_L bajos ($Da_\eta \approx 1$) se considera que la reacción no es suficientemente rápida y el estiramiento de la zona de reacción o flamelets producido por la turbulencia provocará la extinción local de la reacción por difusión de calor y especies intermedias.

El fundamento matemático de la teoría de flamelets es el resultado de introducir un cambio de coordenadas en la descripción del frente de reacción, determinado en $\xi = \xi_{st}$ para llamas no premezcladas (en $c = c^*$ para premezcladas)⁵. El uso de la fracción de mezcla ξ en el cambio de coordenadas origina que las ecuaciones para las especies químicas queden como función de esta variable.

La ecuación instantánea para la fracción de mezcla ξ (ver Capítulo 2) es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\xi) - \nabla \cdot D\nabla\xi = 0. \quad (4.19)$$

Asimismo, la ecuación para la fracción másica Y_α es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}Y_\alpha) - \nabla \cdot (D\nabla Y_\alpha) = S_\alpha. \quad (4.20)$$

Formalmente, las coordenadas globales $[x_1, x_2, x_3]$ se transforman en unas coordenadas locales referidas al frente de reacción, $\xi = \xi_{st}$ (ver figura 4.3), con lo que las nuevas coordenadas son $[\xi, x_2, x_3]$. Las coordenadas x_2 y x_3 son variables espaciales en planos paralelos a la superficie $\xi = \xi_{st}$. La coordenada ξ es, por tanto, perpendicular al frente de llama $\xi = \xi_{st}$. En la ecuación resultante, los términos correspondientes a los gradientes a lo largo del frente de llama, es decir en x_2 y x_3 pueden considerarse despreciables en comparación con los términos en la dirección normal (gradientes en la coordenada ξ). Físicamente, lo anterior implica que la estructura de la llama es localmente unidimensional y depende únicamente del tiempo y la coordenada ξ , lo cual es congruente con la hipótesis principal de flamelet en la que la llama es visualizada como un conjunto de laminas delgadas comparadas con las otras escalas del flujo. De acuerdo al diagrama de la figura 4.2 esto es válido para regímenes con Da altos.

⁵El desarrollo matemático completo puede consultarse en detalle en textos especializados (por ejemplo [184, 185, 198]), aquí sólo se presentan los aspectos básicos del procedimiento para llamas no premezcladas o de difusión.

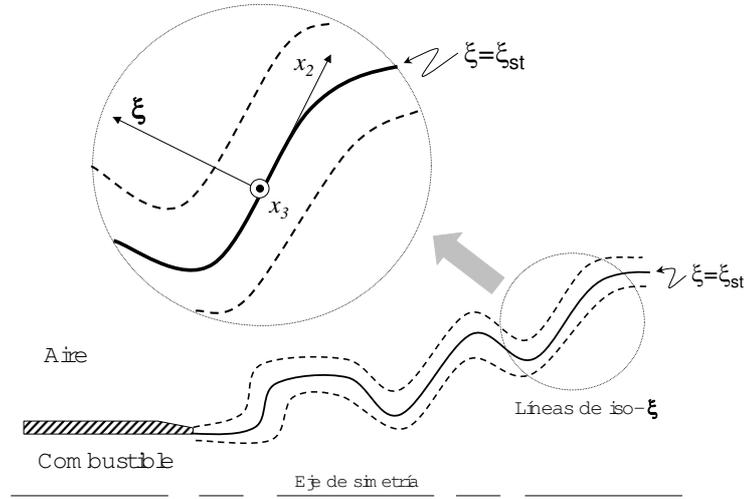


Fig. 4.3: Transformación de coordenadas globales a locales en la formulación para la deducción de la ecuación de flamelets en llamas no premezcladas

Bajo estas hipótesis, en el nuevo sistema de coordenadas la ecuación para Y_α queda [198]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + Y_\alpha \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} \right] \\ & + \frac{\partial Y_\alpha}{\partial \xi} \left[\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \right] \\ & - \rho D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} = S_\alpha. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Los dos términos entre corchetes de la Ecuación (4.21) se cancelan por las ecuaciones de continuidad y fracción de mezcla, y la ecuación queda:

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} = \rho D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} + S_\alpha. \quad (4.22)$$

Si se define la variable χ como la tasa de disipación⁶ de ξ como:

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)^2. \quad (4.23)$$

Sustituyendo (4.23) en (4.22) y considerando la velocidad de reacción de las especies w_α se tiene:

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} = \rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} \right) + w_\alpha. \quad (4.24)$$

⁶Comúnmente conocida en inglés como *escalar dissipation rate*, tiene dimensiones de s^{-1} (igual que S_{ij} o $\nabla \vec{v}$). Su efecto es medir los gradientes de ξ y los flujos moleculares de las especies hacia la llama [198].

La temperatura puede tratarse de la misma manera que Y_α , con lo que se obtiene:

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} = \rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \right) - \frac{1}{C_p} \sum_{\alpha=1}^N h_\alpha w_\alpha. \quad (4.25)$$

Las ecuaciones (4.24) y (4.25) son llamadas ecuaciones de flamelets y revelan una interrelación existente, en el límite de zonas de reacción muy delgadas, entre fracción de mezcla (ξ), tasa de disipación (χ) y velocidad de reacción (w_α); interrelación que se ignora en los modelos de química rápida. El uso de estas ecuaciones en el modelado de la combustión origina los modelos de flamelet transitorios. Los términos en el lado derecho de estas ecuaciones representan el mezclado molecular y la reacción química. Generalmente cerca de la superficie estequiométrica, ambos términos son grandes y de signos opuestos [185]. Cuando el término del lado izquierdo es despreciable frente a los del lado derecho, es posible suponer la estructura de los flamelets como estacionaria:

$$\rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial \xi^2} \right) + w_\alpha = 0, \quad (4.26)$$

$$\rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \right) - \frac{1}{C_p} \sum_{\alpha=1}^N h_\alpha w_\alpha = 0, \quad (4.27)$$

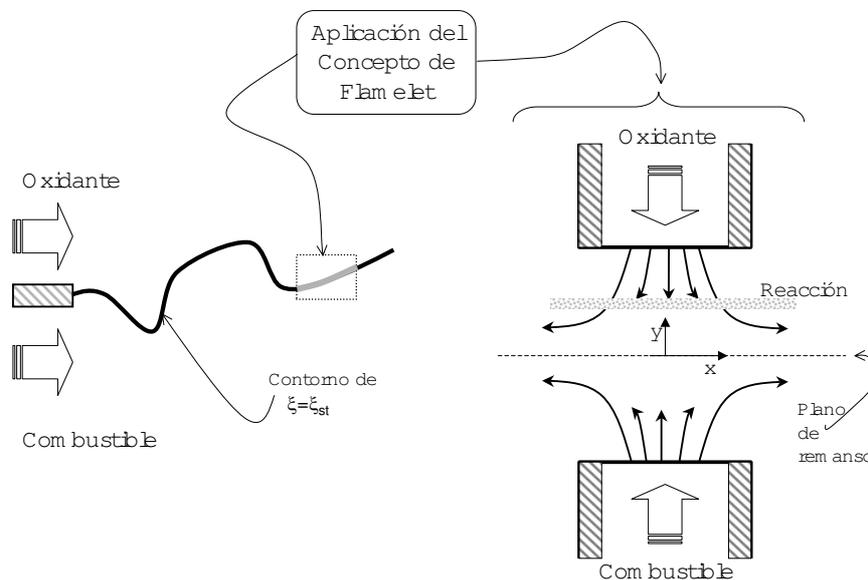


Fig. 4.4: Aplicación del concepto de flamelet laminar para llamas turbulentas no premezcladas

Las ecuaciones (4.26) y (4.27) representan los modelos de flamelets estacionarios en donde, al eliminar el término transitorio y la dependencia de χ con t , se está suponiendo implícitamente que el valor de la tasa de disipación χ no cambia bruscamente en la estructura de la llama⁷ [185].

⁷El efecto de incluir o ignorar el término transitorio de las ecuaciones de flamelet ha sido analizado por algunos

Una configuración en la que estas ecuaciones pueden resolverse de una forma precisa y económica es la reacción química en chorros opuestos. Para el caso de la reacción no premezclada, la configuración consiste en dos chorros (axisimétricos o planos), cada uno con un reactante, que se dirigen uno contra otro (figura 4.4). El flujo tiene un plano de remanso y una zona de reacción que se establece a una cierta distancia de este plano. Esta es la configuración que habitualmente se resuelve para la aplicación del concepto de flamelet laminar en llamas turbulentas no premezcladas. La dependencia de χ con ξ queda establecida por la relación [185, 183]:

$$\chi = \chi^* \exp(-2 [\operatorname{erfc}^{-1}(2\xi)^2]), \quad (4.28)$$

donde χ^* es el valor de la tasa de disipación en $\xi = 0.5$ y erfc^{-1} es la inversa de la función error complementario. Dado un mecanismo químico y unas condiciones de contorno apropiadas, las ecuaciones de flamelet se pueden resolver para obtener las distribuciones laminares de las especies químicas y temperatura:

$$Y_\alpha = Y_\alpha(\xi, \chi^*), \quad T = T(\xi, \chi^*). \quad (4.29)$$

Los perfiles representados por (4.29) son la solución de las ecuaciones estacionarias de flamelets laminares. Entre las principales ventajas de este tipo de modelos está la posibilidad de separar el cálculo de la reacción química de la simulación del flujo, lo que generalmente simplifica el modelado y reduce costes computacionales. El empleo de las soluciones de flamelets laminares, como se discute en la siguiente sección, se realiza teniendo en cuenta las interacciones entre química y turbulencia a través de funciones de densidad de probabilidad.

4.6. Modelo de flamelets en LES

4.6.1. Aplicación del concepto de flamelet laminar al flujo turbulento

Con las ecuaciones de flamelet laminares aplicadas a una configuración unidimensional a contraflujo (figura. 4.4), las variables termoquímicas pueden ser expresadas en función de la fracción de mezcla y de la tasa de disipación tal y como se expresa en (4.29). Similar al proceso habitual en *RANS*, en el contexto de *LES* se puede emplear el concepto de función de densidad de probabilidad filtrada (*FDF*) [200, 79], para tomar en consideración las interacciones entre la turbulencia y la química. Empleando la definición del filtrado de Favre (Ecuación 4.2), para una variable cualquiera ϕ , la *FDF* se define como [40]:

$$\tilde{P}^s(\psi; \vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P^s[\psi, \phi(\vec{x}', t)] G(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}', \quad (4.30)$$

donde ψ representa el espacio de muestreo del escalar ϕ .

La $\tilde{P}^s(\xi, \chi)$ representa la frecuencia de distribución conjunta de los escalares ξ y χ en una

autores y frecuentemente se dan criterios para evaluar la validez y rango de aplicabilidad de las distintas hipótesis que se pueden suponer en flamelet. Generalmente estos criterios se basan en la comparación de las escalas de tiempo asociadas con el flujo y las de la química, es decir, quedan expresados en función del número de Damköhler (ver por ejemplo [183, 92, 194, 46]).

determinada región del flujo⁸, con lo que el valor de \tilde{Y}_α puede ser determinado como:

$$\tilde{Y}_\alpha(\vec{x}, t) = \int_0^1 \int_0^\infty Y_\alpha(\xi, \chi) \tilde{P}^s(\xi, \chi; \vec{x}, t) d\chi d\xi. \quad (4.31)$$

Suponiendo el mismo comportamiento $\chi = \chi(\xi)$ que existe en la configuración de chorros opuestos [185] es posible establecer un vínculo entre la configuración resuelta para los flamelets laminares y el flujo turbulento reactivo:

$$\chi = \chi^* F(\xi) \Theta, \quad (4.32)$$

donde χ^* representa el valor máximo de χ en la lámina reactiva. Puesto que $F(\xi)$ es:

$$F(\xi) = \exp(-2 [\operatorname{erfc}^{-1}(2\xi)^2]); \quad (4.33)$$

χ^* es máximo cuando $\xi=0.5$. Para considerar el efecto por el cambio de densidad en el flujo reactivo, se introduce el factor Θ [284]:

$$\Theta = \frac{3}{4} \frac{(\sqrt{\rho_o/\rho} + 1)^2}{(2\sqrt{\rho_o/\rho} + 1)}, \quad (4.34)$$

donde ρ_o es la densidad de la corriente oxidante.

De esta manera, es posible parametrizar la solución del modelo de flamelet en función de las variables aleatorias ξ y χ^* . Si además se supone la independencia estadística entre ambas variables [43, 42], la \tilde{P}^s conjunta puede descomponerse en el producto de las *FDF's* marginales:

$$\tilde{P}^s(\xi, \chi^*) = \tilde{P}_\xi^s(\xi) \tilde{P}_{\chi^*}^s(\chi^*), \quad (4.35)$$

donde se ha obviado la dependencia espacial y temporal. Por tanto, el valor filtrado de los escalares químicos puede expresarse como:

$$\tilde{Y}_\alpha = \int_0^1 \int_0^\infty Y_\alpha(\xi, \chi^*) \tilde{P}_{\chi^*}^s(\chi^*) \tilde{P}_\xi^s(\xi) d\chi^* d\xi. \quad (4.36)$$

De acuerdo con lo anterior, el cálculo del campo filtrado de especies químicas, a partir de los perfiles generados en la configuración de chorros opuestos, se reduce a determinar o suponer la forma funcional de las *FDF's* de ξ y χ^* .

4.6.2. Forma supuesta para las funciones de densidad de probabilidad filtradas

En la mayoría de las aplicaciones reportadas del modelo de flamelet, tanto en *RANS* (por ejemplo [4, 96, 94]) como en *LES* (por ejemplo [43, 109, 209]), se opta por suponer la forma de las *FDF's* caracterizadas generalmente por los dos primeros momentos estadísticos (media y varianza) del escalar en cuestión. Para la forma funcional de $P^s(\xi)$ se supone comúnmente una función β

⁸Para simplificar la notación, es común no hacer distinción para representar la variable aleatoria y su espacio de probabilidad muestral.

[23], definida como:

$$\tilde{P}_\xi^s(\xi) = \frac{\xi^{a-1} (1-\xi)^{b-1}}{\int_0^1 \xi^{a-1} (1-\xi)^{b-1} d\xi}, \quad (4.37)$$

donde los parámetros a y b están relacionados, en el caso de *LES*, con el valor filtrado $\tilde{\xi}$ y su varianza ξ_v^2 a través de:

$$a = \tilde{\xi}\gamma, \quad b = (1 - \tilde{\xi})\gamma, \quad (4.38)$$

con

$$\gamma = \frac{\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})}{\xi_v^2}. \quad (4.39)$$

La función $P^s(\chi^*)$ es usualmente aproximada mediante una forma *lognormal*:

$$P_{\chi^*}^s(\chi^*) = \frac{1}{\chi^* \sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} (\ln(\chi^*) - \gamma)^2\right], \quad (4.40)$$

donde la media $\tilde{\chi}^*$ y la varianza χ_v^{*2} están relacionadas con los parámetros γ y σ por:

$$\tilde{\chi}^* = \exp\left(\gamma + \frac{\sigma^2}{2}\right); \quad \chi_v^{*2} = \tilde{\chi}^{*2} [\exp(\sigma^2) - 1]. \quad (4.41)$$

Con la forma de las funciones $\tilde{P}_\xi^s(\xi)$ y $\tilde{P}_{\chi^*}^s(\chi^*)$, además de los perfiles de flamelet laminares determinados previamente, la solución a la Ecuación (4.36) queda determinada. Puesto que en una llama es necesario realizar este cálculo repetidas veces, una practica común es hacer la integraciones *a priori* (previo a la simulación principal de la llama turbulenta) y almacenar de algún modo los resultados, generalmente en tablas que posteriormente serán consultadas en la simulación principal. Cada consulta estaría por tanto caracterizada por los valores de $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$ determinados en la simulación. Los detalles numéricos del acoplamiento de los cálculos del modelo de flamelet se abordan en la Sección 5.6.

4.6.3. Modelado de la varianza y de la tasa de disipación

Un aspecto esencial en el modelado de la combustión en *LES* es el cálculo de las cantidades que caracterizan la distribución estadística conjunta de los escalares reactivos y de la temperatura a nivel submalla. Esta distribución estadística es representada por las funciones de densidad de probabilidad filtradas para ξ y χ^* . Cuando se supone la forma de estas funciones, éstas se reconstruyen a través de la media, varianza y tasa de disipación de la fracción de mezcla. El valor medio de ξ coincide con el valor local filtrado $\tilde{\xi}$, por lo puede extraerse directamente de su ecuación de transporte [102]. Para la varianza y la tasa de disipación se recurre al modelado. La mayoría de las estrategias propuestas están basadas en hipótesis de equilibrio local y semejanza de escalas [49, 23, 102]. A continuación se presentan los modelos empleados en esta tesis.

Varianza

La varianza de la fracción de mezcla, ligada a las escalas submalla en el caso de *LES*, se define como [102]:

$$\xi_v^2 = (\tilde{\xi}^2) - (\tilde{\xi})^2. \quad (4.42)$$

Una opción para el modelado de la varianza es deducir su ecuación de transporte [102]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho \xi_v^2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j \xi_v^2}) = & \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi_v^2}{\partial x_j}} \right) - \underbrace{2\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j}}}_{I} + 2\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j}} - & \\ \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \left(\overline{u_j \xi^2} - \tilde{u}_j \tilde{\xi}^2 \right) \right]}_{II} + \underbrace{2\tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \left(\overline{u_j \xi} - \tilde{u}_j \tilde{\xi} \right) \right]}_{III}, & \end{aligned} \quad (4.43)$$

donde en los términos *I*, *II* y *III* aparecen correlaciones filtradas que requieren modelado. El término *I* representa la disipación de la varianza debida a escalas resueltas y residuales, que por, la Expresión (4.23), incluye la tasa de disipación filtrada $\tilde{\chi}$:

$$\overline{\rho \tilde{\chi}} = 2\overline{\rho D \frac{\partial \xi^2}{\partial x_j}}, \quad (4.44)$$

cuyo modelado se discutirá más adelante. Los términos *II* y *III* se modelan mediante la hipótesis del gradiente y una difusividad turbulenta [102]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \left(\overline{u_j \xi^2} - \tilde{u}_j \tilde{\xi}^2 \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_t \frac{\partial \xi^2}{\partial x_j}} \right), \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} 2\tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \left(\overline{u_j \xi} - \tilde{u}_j \tilde{\xi} \right) \right] = & \\ -2\tilde{\xi} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_t \frac{\partial \xi}{\partial x_j}} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_t \frac{\partial \xi^2}{\partial x_j}} \right) + 2\overline{\rho D_t \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j}}, & \end{aligned} \quad (4.46)$$

donde D_t es la difusividad turbulenta del escalar. Incorporando el modelado de estos términos en (4.43), la ecuación de transporte para la varianza de la fracción de mezcla queda:

$$\frac{\partial \overline{\rho \xi_v^2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j \xi_v^2}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \xi_v^2}{\partial x_j} \right] + 2\overline{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} - \overline{\rho \tilde{\chi}}. \quad (4.47)$$

Esta ecuación muestra la relación existente entre el decaimiento de la varianza y la tasa de disipación $\tilde{\chi}$.

Otra práctica muy habitual en *LES* para estimar la varianza es considerar la hipótesis de equilibrio local en la cual todos los términos del transporte de ξ_v^2 en el espacio físico son despreciados. Este procedimiento, análogo al usado en la deducción del modelo de Smagorinsky para la viscosidad turbulenta, conduce a la expresión [23]:

$$\xi_v^2 = C_v \Delta^2 \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_j}, \quad (4.48)$$

donde C_v es un parámetro que puede especificarse ($C_v \approx 0,1$ [23]) o determinarse dinámicamente

[187]. A pesar del amplio uso de la Ecuación (4.48), aún con el coeficiente determinado dinámicamente, ésta puede ser inexacta en algunos flujos donde la hipótesis de equilibrio no sea estrictamente válida (flujos no homogéneos) [102], por lo que en estos casos, es preferible resolver la Ecuación (4.47) para modelar la varianza de la fracción de mezcla.

Raman *et al.* [210] proponen resolver una ecuación de transporte para el término $\tilde{\xi}^2$ y posteriormente calcular la varianza ξ_v^2 con la expresión algebraica (4.42):

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\xi}^2) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{\xi}^2}{\partial x_j} \right] = -\bar{\rho} \tilde{\chi}. \quad (4.49)$$

La principal ventaja de usar esta formulación es que sólo aparece como término fuente el que contiene a la tasa de disipación, por lo que, en principio, es más estable numéricamente [210].

Tasa de disipación

La hipótesis de equilibrio implica que los términos transitorio, convectivo y difusivo en la Ecuación (4.47) son despreciables y, por tanto, se estima que la producción de energía es igual a su disipación. Aplicando este razonamiento se propone una expresión para el modelado de tasa de disipación filtrada [88, 187]:

$$\tilde{\chi} = 2(D + D_t) \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j}. \quad (4.50)$$

Esta expresión se usa frecuentemente; sin embargo, en situaciones donde es incorrecto suponer la hipótesis de equilibrio local y, por tanto, (4.47) es resuelta, Jiménez *et al.* [102] proponen la siguiente expresión para el modelado de $\tilde{\chi}$:

$$\tilde{\chi} = \frac{(\nu + C_s \Delta^2 |\tilde{S}|)}{S c_t C_I \Delta^2} \xi_v^2, \quad (4.51)$$

donde C_I es una constante del modelo que varía entre 0.06-0.09 ($C_I=0.07$ en este trabajo); C_s es la constante de Smagorinsky y $S c_t$ es el número de Schmidt turbulento. La Ecuación (4.51) es ligeramente diferente a la empleada por Colucci *et al.* [40], en la cual χ es definida como:

$$\tilde{\chi} = \frac{(D + D_t)}{\Delta^2} \xi_v^2. \quad (4.52)$$

Raman *et al.* [210] sugieren emplear esta expresión cuando se resuelve la Ecuación (4.49) para el transporte para $\tilde{\xi}^2$.

4.7. Subgrid Linear Eddy Model

En la implementación clásica de *LES* para la fracción de mezcla ξ , el cierre del término Ψ_ξ^s de la ecuación de transporte filtrada (ver Sección 4.3) es modelado habitualmente mediante la hipótesis de la difusión por gradiente. Sin embargo, a pesar del frecuente uso de este procedimiento, existen algunos aspectos no del todo definidos en su implementación. Este tipo de cierre requiere de la especificación del número de Schmidt turbulento, ya sea definido *a priori* (habitualmente en el rango de 0,4 – 0,7) o calculado dinámicamente durante la simulación. Este parámetro, ligado al tamaño de las escalas disipativas turbulentas del escalar, condiciona muchas veces los cálculos y la

estructura final de la llama turbulenta modelada. Por otro lado, puesto que $\tilde{\xi}$ está limitado a valores entre 0 y 1, para evitar oscilaciones o valores fuera de este rango en la solución de la ecuación de transporte de ξ , frecuentemente se emplean esquemas *upwind* de discretización acotados o *TVD* en lugar de los basados en diferencias centradas. En ocasiones, la disipación propia de este tipo de esquemas produce efectos del mismo orden de magnitud que los producidos por el cierre del término Ψ_ξ^s [23].

LEM, del inglés *Linear Eddy Model* es una técnica alternativa que se puede emplear para modelar el mezclado y evolución de cualquier escalar, ya sea reactivo o inerte. A diferencia de la formulación original donde se considera todo el rango de escalas del flujo, en la implementación habitual en *LES*, son las escalas por debajo de la resolución de la malla las que se modelan mediante las técnicas propias del modelo *LEM* (ver figura 4.5). Al modelado de los procesos submalla es necesario agregar el transporte por la convección de las grandes escalas explícitamente resueltas por la malla. La técnica, denominada en esta tesis como *S-LEM*⁹ (*Subgrid Linear Eddy Mixing model*), modela el comportamiento de las pequeñas escalas no resueltas empleando un subdominio unidimensional en cada celda donde trata simultánea, pero independientemente, los procesos de difusión molecular y mezclado turbulento. El rango de escalas submalla modeladas por *S-LEM* está definido por el tamaño del filtro de *LES*, Δ , y la escala más pequeña del flujo (la escala de Kolmogorov, η , o la escala de Batchelor) [174]. Las grandes escalas turbulentas se suponen capturadas directamente por la malla y es un proceso gobernado por el transporte lagrangiano de porciones de subdominios 1D entre celdas contiguas.

Por lo tanto, en *S-LEM* se han de modelar, simultánea e independientemente de acuerdo a su propias escalas temporales y espaciales, los procesos que se listan a continuación.

- Grandes escalas (dominio *LES*):
 - convección.
- Escalas submalla (dominio *LEM*):
 - difusión molecular,
 - convección,
 - procesos de creación/destrucción y en general todo tipo de fuentes.

La implementación de estos procesos en *LES* parte de la descomposición del campo de velocidades [228]:

$$u_i = \tilde{u}_i + (u'_i)^r + (u'_i)^s, \quad (4.53)$$

donde \tilde{u}_i es el campo de velocidades capturado por la malla en *LES*, $(u'_i)^r$ es la fluctuación resuelta de las grandes escalas y $(u'_i)^s$ representa las fluctuaciones submalla no resueltas por la discretización en *LES*. Considerando lo anterior, la ecuación exacta de transporte para un escalar ϕ se puede escribir como:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho [\tilde{u}_i + (u'_i)^r + (u'_i)^s] \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] = S_\phi. \quad (4.54)$$

⁹También puede encontrarse en la literatura como *LEM-LES* [228].

La Ecuación (4.54), al no estar filtrada, es exacta y por tanto, no requiere de ningún término extra o de cierre. De cara la implementación numérica, esta ecuación puede descomponerse separando los procesos acorde al tamaño de las escalas.

- Grandes escalas:

$$\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t_{LES}} = - [\tilde{u}_i + (u'_i)^r] \frac{\partial \phi^n}{\partial x_i}. \quad (4.55)$$

- Escalas submalla:

$$\phi^{n+1} - \phi^* = \int_t^{t+\Delta t_{LES}} \frac{1}{-\rho} \left[\rho(u'_i)^s \frac{\partial \phi^n}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \phi^n}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{w}_\phi \right] dt'. \quad (4.56)$$

Δt_{LES} es el valor del paso temporal empleado en *LES*, ρ es la densidad y D es el coeficiente de difusión. La Ecuación (4.55) describe la convección tridimensional que es resuelta en las grandes escalas del campo de ϕ ; mientras que la Ecuación (4.56) representa los procesos submalla modelados mediante *S-LEM* y sus interacciones con las escalas espaciales y temporales de *LES*. En el integrando del lado derecho de esta última ecuación se incluyen los procesos que ocurren por debajo de la resolución de la malla: mezclado turbulento (convección), difusión molecular y reacción química (en caso de existir).

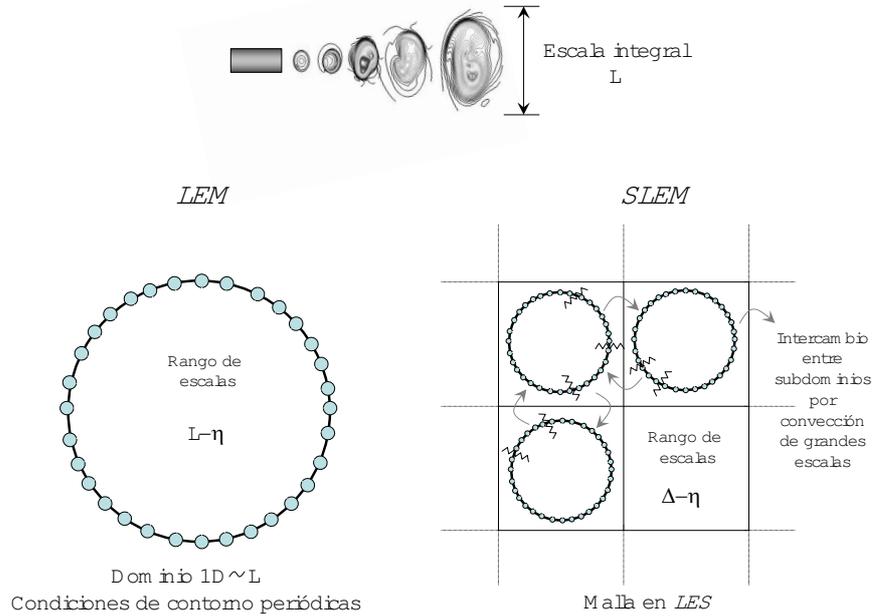


Fig. 4.5: Representación esquemática del modelo *LEM* en su formulación original (izquierda) y formulado como modelo submalla, *S-LEM* (derecha).

4.7.1. Modelado de términos submalla

Los procesos submalla de mezclado turbulento, reacción y difusión molecular involucrados en la Ecuación (4.56) son modelados en *S-LEM* en un dominio unidimensional inmerso en cada celda

de *LES*, donde el integrando es reescrito en términos de las escalas submalla de espacio y tiempo:

$$\rho \frac{\partial \phi^k}{\partial t^s} = -\frac{\partial}{\partial s} \left(\rho D \frac{\partial \phi^k}{\partial s} \right) + F^k + \rho \dot{w}^k, \quad (4.57)$$

donde el superíndice k indica que el campo submalla en cada celda de *LES* es discretizado por N_{LEM} divisiones a lo largo de la coordenada s , de longitud igual al tamaño de filtro en *LES* ($s = \Delta$). El número de elementos, N_{LEM} , es estimado de modo tal que resuelva la escala más pequeña del flujo¹⁰. El término F^k representa la convección originada por las fluctuaciones submalla o de pequeña escala y modelada empleando procesos estocásticos, denominados “*triplet maps*” [112]. Estos procesos alteran la distribución espacial del campo submalla del escalar, simulando cada uno de ellos, el efecto de un torbellino turbulento de menor tamaño que la celda que lo contiene. Si el escalar es reactivo, aparecería el término fuente \dot{w}^k que representa la creación o destrucción del escalar por efecto de la química y su valor vendría determinado por el mecanismo que se utilice¹¹. Asimismo, al considerarse la reacción química en el modelo, se puede deducir una ecuación similar a (4.57) para la temperatura T submalla:

$$\rho C_{p,mix}^k \frac{\partial T^k}{\partial t^s} = \sum_{i=1}^{N_s} \rho C_{p,i}^k D_i^k \frac{\partial \phi_i^k}{\partial s} \frac{\partial T^k}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial s} \left(\bar{\kappa} \frac{\partial T^k}{\partial s} \right) - \sum_{i=1}^{N_s} h_i \dot{\omega}_i + F_T^k, \quad (4.58)$$

donde C_p es el calor específico a presión contante, N_s representa el número de especies presentes, $\bar{\kappa}$ es la conductividad térmica de la mezcla de gases y h_i es la entalpía de la especie i . La ecuaciones (4.57) y (4.58) son discretizadas para cada celda en el espacio de longitud s y se integran temporalmente de acuerdo a una escala de tiempo determinada por la química o la difusión.

El tamaño de paso temporal impuesto por el proceso de difusión de calcula como:

$$\Delta t_{Dif} = C_{Dif} \frac{(\Delta s)^2}{\max(\nu, D)}, \quad (4.59)$$

donde C_{Dif} es una constante ($C_{Dif}=0.25$) para la estabilidad numérica del proceso de solución [255].

Los procesos de *triplet maps* involucrados en la convección submalla F^k , al igual que en la formulación original de *LEM*, son gobernados por tres parámetros:

1. λ , que representa la frecuencia del evento por unidad de longitud;
2. $f(l)$, o función de densidad de probabilidad de l , que determina la distribución del tamaño l de torbellinos en el dominio submalla 1D, estando l en el rango $\Delta - \eta$; y
3. la localización aleatoria del evento dentro del dominio 1D.

La distribución de tamaños, $f(l)$, debe reproducir la distribución de torbellinos de la cascada de Kolmogorov, por lo que de acuerdo a Kerstein [114]:

$$f(l) = \frac{5}{3} \frac{l^{-8/3}}{\eta^{-5/3} - \Delta^{-5/3}}; \quad \eta < l < \Delta. \quad (4.60)$$

¹⁰En gases, habitualmente $Sc \approx 0.7$, con lo que que la escala de Batchelor resulta mayor que la escala de Kolmogorov, η [152].

¹¹En esta tesis se ha empleado un mecanismo global de un paso, descrito en la Sección 4.8.3.

Suponiendo que la difusividad que inducen en el escalar, calculada como la asociada al movimiento aleatorio de una partícula bajo estos procesos, sea del orden de la difusividad turbulenta submalla ($\approx \nu Re^s$) y una distribución de Poisson para el tiempo entre procesos [114], la frecuencia por unidad de longitud, λ , se determina como:

$$\lambda = \frac{54 \nu Re^s (\Delta/\eta)^{5/3} - 1}{5 C_\lambda \Delta^3 1 - (\eta/\Delta)^{4/3}}, \quad (4.61)$$

donde Re^s , el número de Reynolds submalla, es definido como $Re^s = u' \Delta / \nu$, con $u' = \sqrt{\frac{2}{3} k^s}$, en donde k^s , la energía cinética turbulenta submalla, se obtiene de su ecuación de transporte (Ecuación (3.57)). La constante C_λ está relacionada con las escalas de la difusividad turbulenta del escalar:

$$\frac{1}{C_\lambda} = C_\nu, \quad (4.62)$$

donde C_ν es constante empleada para la viscosidad turbulenta en el modelo de una ecuación para k^s (en este trabajo $C_\nu = 0.67$ [239]). Por tanto, $C_\lambda \approx 15$, aunque puede tomar otros valores (ver por ejemplo [31, 33, 151]).

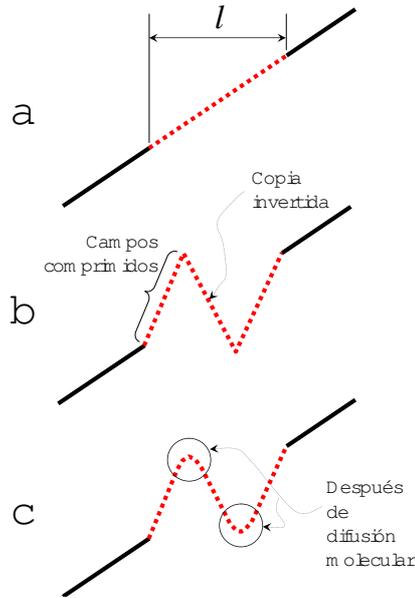


Fig. 4.6: Representación esquemática del proceso de *triplet map*. a: Selección aleatoria de posición y tamaño (l) del torbellino; b: alteración ocasionada por el *triplet map*; c: la difusión molecular suaviza las discontinuidades del gradiente del escalar.

A partir de la frecuencia de eventos λ , se puede determinar el intervalo de tiempo entre éstos:

$$\Delta t_F = \frac{1}{\lambda \Delta}. \quad (4.63)$$

En cada evento, el dominio es alterado por el *triplet map*. Matemáticamente, el proceso de *triplet map* consiste en generar tres copias de tamaño l del campo original, comprimir las por un

factor de tres, invertir una copia y colocarla en medio de las otras para formar el nuevo campo. Este proceso se representa en la figura 4.6. Cuando se invierte la copia de en medio, no se generan discontinuidades en el campo del escalar; por el contrario, las discontinuidades aparecen en las derivadas del escalar que, sin embargo, son posteriormente suavizadas por el proceso de difusión¹². En resumen, cada Δt_F , un segmento aleatorio del subdominio 1D es afectado por el *triplet map* simulando un torbellino 3D, de tamaño l obtenido a partir de $f(l)$, modelando de esta manera la cascada de energía y los rangos de escalas de la turbulencia. El campo de cualquier escalar en el subdominio 1D, bajo este procedimiento, se considera alineado en la dirección del gradiente máximo del escalar [112].

El valor del escalar en la celda de *LES*, equivalente al filtrado de Favre $\tilde{\phi}$, se obtiene mediante la expresión:

$$\tilde{\phi} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{N_{LEM}} \rho^k} \left[\sum_{k=1}^{N_{LEM}} (\rho \phi_i)^k \right] \quad (4.64)$$

4.7.2. Modelado de términos de gran escala

La parte del modelo descrita en la sección anterior determina sólo los procesos de pequeña escala dentro de cada celda de *LES*. Para completar el transporte del escalar es necesario incluir la convección de estos campos submalla a través de las celdas de *LES* debida a las grandes escalas del movimiento resuelto. El término convectivo representado por la Ecuación (4.55) es modelado a través del transporte lagrangiano de porciones de campos de escalares entre celdas vecinas (ver figura 4.5, lado derecho). La técnica, denominada “*splicing*” [237], consiste en seleccionar aleatoriamente una parte del campo 1D y transportarla a la celda adyacente de acuerdo a los gastos máxicos entre celdas. En los flujos se consideran tanto las escalas de velocidad localmente resueltas por la malla *LES*, como las escalas submalla. Las grandes escalas son explícitamente obtenidas del cálculo en *LES*, mientras que la contribución submalla se estima a partir de la energía cinética turbulenta de las escalas submalla, k^s , como:

$$u'_{sgs} = \sqrt{\frac{2}{3} k^s}, \quad (4.65)$$

suponiendo que las fluctuaciones de pequeña escala son estadísticamente isotrópicas¹³. La porción o número de elementos transportados del subdominio unidimensional se determina en esta tesis como:

$$N_{splice} = \Delta t_{LES} \left[\frac{\rho (\tilde{u}_i + u'_{sgs,i}) S_{m,i}}{\Delta m_{LES}} \right] N_{LEM}, \quad (4.66)$$

donde $\tilde{u}_i + u'_{sgs,i}$ se calcula en cada una de las caras de la celda definidas mediante el vector área $S_{m,i}$; N_{LEM} es el número total de celdas o elementos del dominio submalla y Δm_{LES} es la masa contenida en la celda de *LES*. Mediante esta expresión se está suponiendo que cada elemento del subdominio 1D posee una porción de la masa de la celda (a diferencia de la formulación original en la que cada elemento representa una porción del volumen [32, 174]).

La evolución del transporte mediante el *splicing*, en su versión original, es de un orden equivalente a un esquema *upwind*. En esta tesis se han incorporado contribuciones de alto orden mediante

¹²El algoritmo discreto del proceso de *triplet maps* se puede consultar en la Sección 5.7; más detalles en [114].

¹³Mediante este procedimiento, la difusión en sentido contrario al gradiente es explícitamente incluida [241].

una estrategia similar a la adoptada en el método de volúmenes finitos. Los detalles pueden consultarse en el Apéndice B. La implementación del algoritmo de *splicing* y su acoplamiento a *LES* se describen en la Sección 5.7.

4.7.3. Varianza y tasa de disipación en *S-LEM*

La evolución de un escalar en cada celda de *LES* se realiza sobre un dominio unidimensional con condiciones periódicas en los extremos. Desde el punto de vista físico, es más adecuado considerar cada uno de los subdominios unidimensionales como curvas locales, espaciales y transitorias, alineadas de acuerdo al gradiente de la concentración del escalar. Por tanto, la derivada espacial en s (unidimensional) del campo de cualquier concentración puede interpretarse como el gradiente local (tridimensional) de dicha concentración más que su proyección en una coordenada fija sobre una línea recta [114]. Por ello, el modelo análogo para determinar la tasa de disipación de un escalar ξ en *S-LEM* puede expresarse como:

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right)^2 \equiv \chi^k = 2D \left(\frac{\partial \xi}{\partial s} \right)^2. \quad (4.67)$$

Del mismo modo que para el equivalente de un campo filtrado de un escalar, el valor medio $\tilde{\chi} |^{S-LEM}$ es determinado mediante el promediado de Favre expresado por (4.64).

La varianza para cada celda de *LES* puede determinarse de acuerdo a la definición (4.42) como:

$$\xi_v^2 |^{S-LEM} = \tilde{\xi}^2 - \tilde{\xi}^2. \quad (4.68)$$

4.8. Representación de la cinética química

A los requisitos de una predicción empleando *LES* (simulación transitoria, dominio tridimensional y mallas finas, principalmente), hay que agregar el cálculo de la cinética química. Para aliviar en parte el coste computacional asociado con este último aspecto se han desarrollado diversas estrategias para optimizar el cálculo de las tasas de reacción durante la simulación del flujo. A grandes rasgos, estas estrategias se clasifican en dos:

1. la reducción o simplificación del sistema químico y
2. el acoplamiento de la química al cálculo.

4.8.1. Reducción del sistema químico

La combustión de incluso los hidrocarburos más sencillos, como el metano, tiene lugar a través de un gran número de reacciones y especies. Un mecanismo detallado como el GRI-Mech para el metano, en su versión 3.0, representa una compilación de 325 reacciones químicas elementales junto con sus coeficientes y parámetros termoquímicos asociados para las 53 especies que involucra [238]. Los requisitos computacionales de emplear un mecanismo de este tipo están ligados, por un lado, a la dimensionalidad del sistema (en términos de especies), y por otro, a la disparidad de escalas temporales asociadas con las velocidades de reacción (*stiffness*). Una práctica habitual es reducir el sistema químico a un número tratable de especies y reacciones. El sistema resultante se denomina mecanismo reducido, el cual debe predecir de forma correcta las características globales del fenómeno y las especies de interés [269].

Los mecanismos reducidos pueden clasificarse en dos tipos: los sistemáticamente reducidos y los globales.

La reducción sistemática se realiza generalmente a partir de la identificación de mecanismos (comúnmente referidos como mecanismos *skeletal*) que contienen sólo las especies y pasos de reacción más relevantes del mecanismo detallado y a los que se aplican secuencialmente una serie de hipótesis de estado estacionario y de equilibrio parcial para algunas reacciones [89]. A menudo, este proceso se realiza progresivamente y en varios ciclos. El sistema resultante es un mecanismo con menos especies y *stiffness*. Sin embargo, dado que el análisis y reducción del sistema se hace para determinadas condiciones termoquímicas, frecuentemente el mecanismo resultante sólo es válido para éstas.

Los mecanismos globales, a diferencia de los sistemáticamente reducidos, se obtienen postulando previamente las especies y las reacciones que compondrán el sistema final. Esta selección puede efectuarse a partir de un conocimiento previo del sistema y de las necesidades de modelización (por ejemplo, puede desearse que esté presente cierta especie que influya en la formación de contaminantes) o a un análisis empleando algunas de las técnicas de reducción sistemática. Los parámetros cinéticos asociados a las distintas reacciones que intervienen en el mecanismo son ajustados de manera que el mecanismo reducido reproduzca algunos de los comportamientos fundamentales del sistema original, como por ejemplo la velocidad de propagación del frente de reacción.

4.8.2. Técnicas de acoplamiento de la química al cálculo

Estas técnicas generalmente consisten en el almacenamiento del cálculo, previamente a la simulación, de la composición termoquímica como función de parámetros que pueden ser determinados durante el modelado del flujo. Con ello se consigue separar el cálculo químico de la simulación propia del flujo turbulento.

Entre estas técnicas se encuentran la tabulación previa de los estados termoquímicos para todas las posibles condiciones durante la simulación. Estas tablas son posteriormente consultadas durante la simulación para extraer los valores mediante una interpolación. Este tipo de tablas se conocen habitualmente como *LUT (Look Up Table)* [72]. El tamaño que puedan tener estas tablas esta muchas veces limitado por la memoria de los equipos de cálculo.

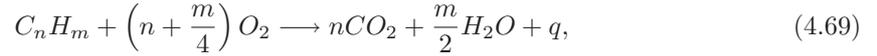
Existen métodos más sofisticados como el denominado *ISAT (In Situ Adaptive Tabulation)* [201], que optimiza la tabulación concentrándola en las regiones a las que se accede durante la simulación; o el empleo de redes neuronales artificiales (*ANN*) [20, 19, 18, 36], con las que se consigue un considerable ahorro de memoria con tiempos de cálculo moderados; sin embargo, requieren de un proceso detallado de entrenamiento previo para obtener la precisión adecuada.

En esta tesis se han empleado tablas de interpolación (*LUT*) para almacenar los cálculos químicos del modelo de flamelet. Los detalles de su construcción y posterior implementación pueden consultarse en el Apartado 5.6. El mecanismo químico usada para el modelo de flamelets es un mecanismo reducido (*skeletal*) que consta de 16 especies y 35 reacciones [242, 16] (puede consultarse en el Apéndice E); para el modelo *S-LEM* se emplea un mecanismo químico de un paso que ajusta el calor liberado en la reacción y la temperatura de activación en función del ratio de equivalencia [68].

4.8.3. Mecanismo químico de un paso para la combustión de hidrocarburos

Para modelar el término reactivo en las ecuaciones submalla de *S-LEM*, en esta tesis se ha empleado una cinética química de Arrhenius de un sólo paso y de primer orden, recientemente propuesta por Fernández-Tarrazo *et al.* [68], para la descripción numérica de la combustión de hidrocarburos.

El esquema considera la reacción irreversible, entre un hidrocarburo y el oxígeno del aire, con la forma:



y una tasa de reacción igual a:

$$w = B \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) C_{C_n H_m} C_{O_2}. \quad (4.70)$$

El hidrocarburo en las configuraciones de esta tesis es el metano (CH_4), por tanto, $n = 1$ y $m = 4$; C_k representa la concentración de la especie k . El calor liberado en la reacción, representado por q , es ajustado a través del ratio de equivalencia Φ [274] para describir el efecto de la oxidación parcial del hidrocarburo en condiciones de combustión rica ($\Phi > 1$):

$$\begin{cases} \Phi \leq 1 : & \frac{q(\Phi)}{q_0} = 1, \\ \Phi \geq 1 : & \frac{q(\Phi)}{q_0} = 1 - \alpha(\Phi - 1), \end{cases} \quad (4.71)$$

donde α es un parámetro que cambia dependiendo del hidrocarburo,

$$\alpha = \frac{-[h_{C_n H_m} - n(h_{CO_2} - 2h_{H_2O})]}{q_0}. \quad (4.72)$$

Para el metano $\alpha=0.21$. La cantidad de calor liberado por *mol* de combustible consumido, q_0 es determinada de acuerdo a la expresión $q_0 = h_{C_n H_m} - n h_{CO_2} - (m/2) h_{H_2O}$, donde h_k es la entalpía de formación por *mol* de especie k . Para el metano, $q_0 = 802.4 \text{ kJ/mol}$.

En la Ecuación (4.70), la temperatura de activación T_a también se ajusta de acuerdo a los siguientes criterios:

$$\begin{cases} \Phi \leq 0.64 : & \frac{T_a}{T_{a0}} = 1 + 8.250(\Phi - 0.64)^2; \\ 0.64 \leq \Phi \leq 1.07 : & \frac{T_a}{T_{a0}} = 1; \\ \Phi \geq 1.07 : & \frac{T_a}{T_{a0}} = 1 + 1.443(\Phi - 1.07)^2; \end{cases} \quad (4.73)$$

donde T_{a0} es un valor constante de la temperatura de activación igual a $15900K$. El valor de la constante B es igual a

$$B = 6.9 \times 10^{14} \frac{\text{cm}^3}{\text{mol s}}. \quad (4.74)$$

Considerando un número de Lewis unitario se puede determinar la distribución de Φ en función de la fracción de mezcla, ξ , en cada punto y obtener los valores de $T_a(\Phi)$ y $q(\Phi)$ con las condiciones

locales de mezclado:

$$\Phi = \left[\frac{32 \left(n + \frac{m}{4} \right)}{12n + m} \right] \left[\frac{Y_{C_n H_m, F}}{Y_{O_2, A}} \right] \left[\frac{\xi}{1 - \xi} \right], \quad (4.75)$$

donde $Y_{C_n H_m, F}$ y $Y_{O_2, A}$ representan los valores de las fracciones másicas de combustible y oxígeno en las respectivas corrientes de donde provienen.

4.9. Conclusiones

En este capítulo se han presentado las ecuaciones de transporte filtradas que complementan las presentadas en el capítulo anterior, junto con las estrategias de cierre y modelos de combustión más comúnmente empleadas en aplicaciones de *LES* a flujos turbulentos reactivos. A efectos de modelar la combustión turbulenta, el proceso puede considerarse compuesto de tres fenómenos principales: la dinámica del flujo turbulento, la cinética química y la interacción química-turbulencia. Por tanto, el sistema matemático completo para modelar un flujo turbulento incluye las ecuaciones y modelos de los Capítulos 3 y 4). En la descripción de modelos se ha puesto énfasis en las técnicas que empleadas en esta tesis. Gran parte del progreso obtenido en la simulación de la combustión turbulenta con *LES* se debe a la adaptación de técnicas ampliamente validadas en el contexto de *RANS*. Puesto que los requisitos computacionales de *LES* son considerablemente mayores, la elección de una técnica que permita optimizar el cálculo y acoplamiento de la química al flujo será crucial y dependerá igualmente de factores como la capacidad de los equipos de cómputo utilizados. En este trabajo, se emplean dos estrategias para el modelado de la combustión y su interacción con la turbulencia. En la primera, se ha recurrido al concepto de flamelet, que en combinación con un escalar conservado (fracción de mezcla), permite separar el cálculo de la turbulencia y de la química. En la segunda, se ha utilizado la técnica denominada *Subgrid Linear Eddy Model*, *SLEM*, como modelo submalla para determinar la evolución del campo de escalares. En este último método, se separa el campo de escalares en escalas grandes, resueltas por la malla, y en escalas submalla que son calculadas en un dominio unidimensional.

En el siguiente capítulo se presentan los detalles numéricos correspondientes a la solución del sistema de ecuaciones y los detalles numéricos de la implementación y acoplamiento de los modelos empleados.

Capítulo 5

Método numérico

En este capítulo se presenta el método de solución para las ecuaciones filtradas, así como los detalles numéricos que deben ser considerados en el acoplamiento de los diversos modelos empleados. En esta tesis se ha empleado un *solver* o código numérico que mediante la técnica de volúmenes finitos determina la solución a las ecuaciones de transporte. Los detalles del método numérico se presentan en las primeras secciones junto con los diferentes tipos de errores numéricos asociados con la discretización e integración de las ecuaciones de transporte. Para la especificación de las condiciones de contorno se describen las estrategias más comunes señalando las empleadas en esta tesis. Al código principal se han incorporado las subrutinas necesarias para el acoplamiento de los algoritmos correspondientes al modelado de la turbulencia, esquemas de discretización de alto orden y modelado de reacción química e interacción con la turbulencia. Los perfiles generados con las ecuaciones de flamelets laminares, su integración numérica con las *PDFs* y la tabulación se realiza previamente a la simulación del flujo. Los distintos procesos que intervienen en el modelo *S-LEM* actúan simultáneamente al *solver* de *LES* de acuerdo a sus correspondientes escalas de tiempo.

5.1. Proceso de solución

Una vez definido el conjunto de ecuaciones, estrategias de cierre y modelos a utilizar, en este capítulo se describe lo concerniente al método de solución. En la presente investigación, se ha empleado el código PHOENICS [186] para dar solución a las ecuaciones de transporte mediante la técnica de volúmenes finitos. A este código se han acoplado diversas subrutinas que incorporan modelos de turbulencia para *LES*, el modelado de la combustión mediante flamelets, el modelo *S-LEM*, esquemas de alto orden y, en general, cálculos estadísticos, propiedades del flujo y condiciones de contorno. Aunque no al nivel de *DNS*, *LES* es una técnica que requiere de recursos de cómputo considerables. Ante ello, las técnicas de paralelización de los cálculos juegan un papel crucial en las simulaciones de este tipo, sobre todo tratándose de aplicaciones prácticas. Éste, entre otros factores, ha sido un importante aspecto en la elección de un código para resolución de las ecuaciones.

Los cálculos relativos al modelo de flamelets son realizados *a priori* mediante el programa RUN-1DL [221, 222]. Los perfiles generados son posteriormente integrados con las *PDFs* y los resultados almacenados en una tabla que posteriormente es leída e interpolada por el código de *CFD*. La consulta de la tabla con los estados termoquímicos se realiza en función del cálculo en cada celda de las propiedades. A su vez, la termoquímica puede alterar estas propiedades, modificando los campos del flujo turbulento conforme avanza el proceso de solución.

En cuanto a la implementación del modelo *S-LEM*, éste se ha programado como un módulo compuesto por subrutinas en FORTRAN acopladas directamente al código principal. Los procesos involucrados en este modelos actúan de acuerdo a sus propias escalas de tiempo.

El objetivo de este capítulo es presentar los detalles numéricos de la solución de las ecuaciones filtradas descritas en capítulos anteriores y el acoplamiento e interacción de los modelos y esquemas implementados.

5.2. Método de volúmenes finitos

Las ecuaciones de transporte filtradas, introducidas en los Capítulos 3 y 4, se pueden representar mediante una ecuación general, donde la variable dependiente está representada por la variable genérica $\tilde{\phi}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi\nabla\tilde{\phi}) = \bar{S}_\phi. \quad (5.1)$$

Γ_ϕ representa el coeficiente de difusión y \bar{S}_ϕ es el término fuente. El lado derecho de la Ecuación (5.1) contiene los términos transitorio, convectivo y de difusión respectivamente. Los términos Γ_ϕ y \bar{S}_ϕ son específicos para cada variable $\tilde{\phi}$. (Para la ecuación de continuidad, por ejemplo, $\tilde{\phi}=1$.)

La Ecuación (5.1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (ver figura 5.1), asociando a cada uno de ellos un punto nodal en el centro. De forma similar, el tiempo se discretiza en intervalos temporales. La ecuación diferencial se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal; el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P\tilde{\phi}_P = \sum_{i,I} a_i\tilde{\phi}_I + a_T\tilde{\phi}_T + B, \quad (5.2)$$

donde el subíndice I representa las celdas vecinas, i la cara entre las celdas P e I , T el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior y B el término fuente. A continuación se describe brevemente el proceso de solución mediante método de volúmenes finitos¹.

En el caso de una malla cartesiana, decalada (“*staggered*”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional² (el paso a la formulación en 3D es inmediato) es como el mostrado en la figura 5.2. En una malla decalada, las variables escalares como por ejemplo, la presión, entalpía o las fracciones másicas, se encuentran definidas en el centro

¹La deducción detallada de la Ecuación (5.2) y las técnicas de solución numérica puede consultarse en numerosos textos de Fluidodinámica Computacional (por ejemplo en [39, 178, 182, 262]).

² El espesor de la celda en la dirección z puede considerarse como la unidad.

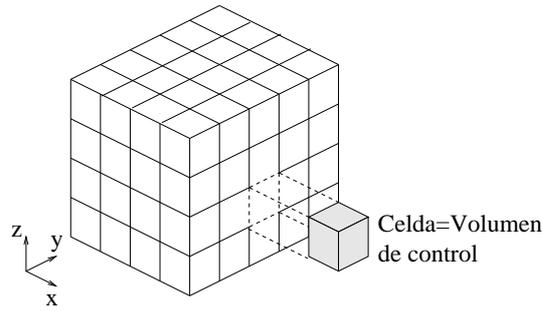


Fig. 5.1: Representación de un sistema discretizado con una malla estructurada en volúmenes finitos.

de la celda, mientras que las componentes de velocidad correspondientes se encuentran desplazadas a las caras de la celda en cada dirección.

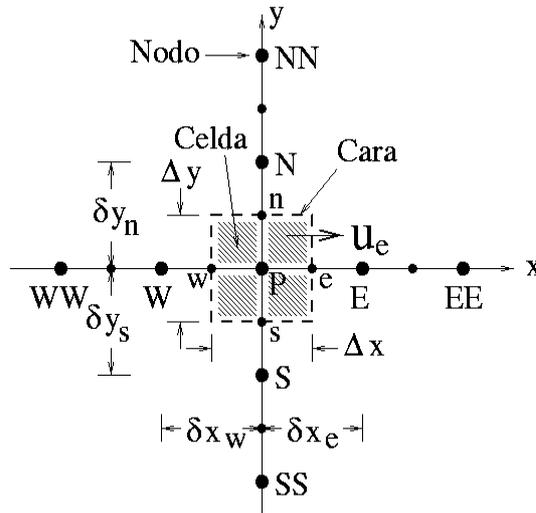


Fig. 5.2: Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

En la figura 5.2 se muestra la notación habitual de la celda analizada y de sus colindantes para mallas cartesianas. Dada una celda P, sus vecinos se denotarán según las iniciales de los puntos cardinales (E,W,N y S del inglés *East, West, North, South*) en las direcciones x e y respectivamente. Las caras de la celda se denotan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. Los intervalos temporales se denotan con la letra T.

Definiendo los símbolos F , D y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D}; \quad (5.3)$$

donde \tilde{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i , y Pe es el número de Peclet, que es un ratio entre la convección y la difusión. Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (5.1), respectivamente.

Los coeficientes a_i de la Ecuación 5.2 son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0). \quad (5.4)$$

Los valores de F y D en la cara de la celda de la Ecuación 5.4 son:

$$F_i = (\tilde{\rho}\tilde{v})_i A_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i A_i}{(\delta_i)}, \quad i = n, s, e, w, \quad (5.5)$$

donde A_i corresponde al área de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\tilde{\rho}$ y \tilde{u}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (5.1) requiere también el conocimiento de las variables escalares, $\tilde{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \tilde{v}_i está calculada en la cara si la malla es decalada, pero $\tilde{\rho}$ y $\tilde{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (5.2). La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de $\tilde{\rho}$ y $\tilde{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la Ecuación (5.4) depende del esquema de interpolación (ver Apéndice A). Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido [178]:

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0,5|Pe|). \quad (5.6)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t}. \quad (5.7)$$

Para el cálculo del término D_i (5.5) se necesita obtener el coeficiente de difusión, Γ_i , en la cara de la celda. El coeficiente Γ_i no es necesariamente una constante, sino probablemente función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo, la temperatura), y por lo tanto es necesario interpolarlo a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Para la cara e , por ejemplo, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e}, \quad \Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)}. \quad (5.8)$$

El término fuente de la ecuación general 5.1, \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_P, \quad (5.9)$$

donde término $\bar{S}_{\phi,v}$ se elige de acuerdo con la relación existente entre \bar{S}_ϕ y $\tilde{\phi}$, en caso de depender el primero del segundo. El objetivo de la linealización del término fuente es mejorar la convergencia de la solución.

Con esta suposición, los términos B y a_P de la ecuación (5.2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (5.10)$$

$$a_P = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y. \quad (5.11)$$

La Ecuación (5.2) se aplica en cada celda del dominio para cada $\tilde{\phi}$ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales ³ que puede ser resuelto utilizando, en principio, cualquier método de resolución de ecuaciones lineales.

En el cálculo de las velocidades, a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento, se tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en estas ecuaciones, no tiene una ecuación propia para calcularla. Una solución ampliamente utilizada es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión. Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento están los de la familia SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [178, 179, 262, 246]. El algoritmo utilizado en esta investigación para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

El proceso de solución es iterativo y, durante éste, las ecuaciones del sistema, en general, no se cumplen; el imbalance entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. La convergencia del proceso iterativo se da cuando los residuos disminuyen. Para procurar o acelerar esta convergencia se utiliza un método de relajación para algunas de las variables dependientes y propiedades. Existen dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea habitualmente para las velocidades, aumentando la influencia de la diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de $\tilde{\phi}$ el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho} V_P}{\Delta t_f} \left(\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)} \right), \quad (5.12)$$

donde V_P es el volumen de la celda P , Δt_f es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteración. Para la presión y la densidad se emplea la relajación lineal dada por:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)}, \quad (5.13)$$

donde α es el factor de relajación, el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedad determinado por el proceso de solución en la iteración actual. El factor de relajación, α , normalmente toma valores entre 0 y 1.

El criterio de convergencia utilizado para detener el proceso iterativo para un paso temporal dado y pasar al siguiente es tal que, para cada variable, la suma de los valores absolutos de los residuos en todo el dominio sea menor que un determinado porcentaje de un valor de referencia.

5.3. Discretización espacial

La discretización espacial de las ecuaciones de transporte es un aspecto de vital importancia en *LES* puesto que está, en la mayoría de los casos, directamente relacionado con el tamaño del filtro impuesto y, por tanto, influye en la representación o modelado de los términos submalla.

Cuando se discretiza un campo, implícitamente se está imponiendo un filtrado de los datos; si el tamaño resultante de la discretización es menor a la escala más pequeña del movimiento del flujo, el filtrado no tendrá efecto alguno y por tanto se obtendrá una buena representación del campo. Por el contrario, si la discretización es mayor que la escala más pequeña, el mallado no

³Los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente, de $\tilde{\phi}$, por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal.

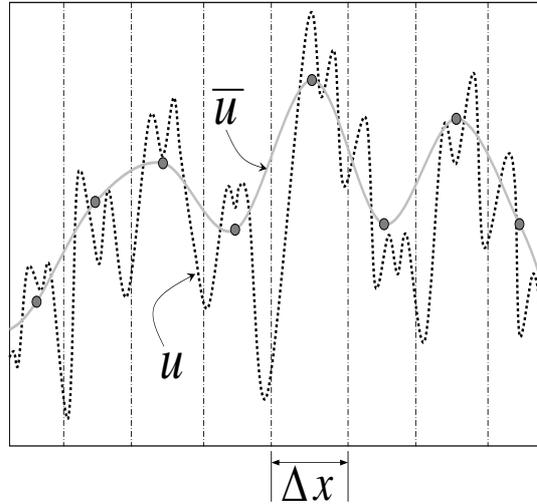


Fig. 5.3: Diagrama esquemático del filtrado resultante en la discretización de un campo de velocidad unidimensional de acuerdo a lo propuesto por Schumann [233].

podrá representar ésta última y habrá sido por tanto, filtrada. Este tipo de filtrado ligado a la propia resolución de la malla se conoce como filtrado implícito⁴ y es el más común en el modelado con *LES* de flujos turbulentos. Este tipo de filtrado sería equivalente al de tipo caja presentado en la tabla 3.1, aunque en un sentido estricto, la equivalencia sólo es total para casos con mallas isotropas [50]. Así pues, el proceso de discretizar las ecuaciones de un flujo da origen a un campo filtrado (figura 5.3). Schumann [233] analizó en detalle esta circunstancia y determinó que, por ejemplo, en una malla unidimensional, el filtrado equivale a integrar en cada celda o volumen de control la variable continua:

$$\bar{u} = \frac{1}{\Delta x} \int_{\Omega} u(x) dx. \quad (5.14)$$

Uno de los problemas de usar directamente la discretización como proceso de filtrado es la falta de control sobre el tamaño del filtro; problema que en ocasiones se agudiza al usar mallas de espaciado no uniforme, introduciendo errores de conmutación en las derivadas espaciales. Además, el filtrado implícito lleva asociados errores de representación de las menores escalas resueltas, ya que para representar una función cuya menor escala fuera Δx , el tamaño del mallado para capturarla adecuadamente debería ser de al menos $\frac{1}{2}\Delta x$ [38].

Por tanto, además de los errores propios del modelado de los efectos de pequeña escala, que inevitablemente existen, los resultados se pueden ver influidos o invalidados por errores asociados a la discretización, los cuales es preciso, si no eliminar, al menos reducir su impacto [101].

5.3.1. Errores por resolución de la malla

En *LES*, el mallado ha de ser lo suficientemente fino de manera que el filtrado de escalas se realice en el subrango inercial de la cascada de energía (ver Capítulo 3). Entre algunos autores (por ejemplo [203] y [209]) existe cierto consenso en el criterio para evaluar la resolución de la

⁴Existe además el filtrado explícito, donde se desacopla el ancho del filtro con la resolución de la malla; generalmente se emplea un ancho de filtro tal que $\Delta \geq 2\Delta x$.

malla: ésta debe capturar al menos el 80 % de la energía cinética turbulenta del flujo; dicho en otras palabras, el modelado de las escalas submalla no debe representar más del 20 % de la energía cinética de la turbulencia. Sin embargo, habitualmente, la cantidad de energía cinética turbulenta que captura una malla no se conoce *a priori*; aunque puede calcularse *a posteriori* el proceso de verificación del mallado se volvería recursivo y, por tanto, costoso.

Generalmente, en las predicciones con *LES* no se realiza un análisis detallado de los errores numéricos. La practica habitual para validar un cálculo, aparte de comparaciones directas con datos experimentales, consiste en variar el mallado y comprobar su efecto en los resultados. Se considera que el efecto es despreciable cuando la estadística (medias, varianzas, etc) del campo de variables no cambia significativamente; tomando siempre en cuenta el compromiso entre precisión de los resultados y coste computacional. Los posibles errores residuales estarían compensados por ajustes en los diversos parámetros de los modelos⁵ (por ejemplo, en la calibración de la constante de Smagorinsky o en los esquemas de discretización empleados).

5.3.2. Errores de *aliasing*

Los términos no lineales pueden dar lugar a errores de *aliasing* en su versión discreta. Este tipo de errores aparece cuando las variables son multiplicadas en el espacio físico. Por ejemplo, aún cuando dos campos \bar{u} y \bar{v} estén adecuadamente representados en la malla, el producto \overline{uv} contiene términos correspondientes a la suma de los números de onda de ambos, que podrían no ser captados por la resolución de la malla. En métodos que emplean el filtrado explícito, donde el tamaño del filtro y del mallado son independientes, los errores de *aliasing* pueden ser reducidos cumpliendo un relación filtro-malla de al menos $\Delta = 2\Delta x$ [38]. Sin embargo, en el filtrado implícito, donde el tamaño del filtro queda definido directamente por la discretización, este tipo de errores son inevitables y sólo disminuyen al aumentar la resolución del mallado [84].

5.3.3. Errores en la discretización de los operadores de derivación

Los términos de las ecuaciones de transporte requieren de integración sobre un volumen de control. La discretización y posterior integración puede realizarse con distintos ordenes de aproximación, buscando reducir al mínimo los errores en la solución de las ecuaciones y evaluar de adecuadamente el comportamiento de los modelos empleados. Los esquemas de discretización de alto orden requieren generalmente valores de ϕ en distintos puntos de la celda, por ejemplo en las caras, o incluso en celdas vecinas. Estos valores pueden ser obtenidos mediante la interpolación entre valores nodales o empleando algunas funciones de forma [182].

La discretización de los términos convectivos en las ecuaciones de transporte de *LES* es un aspecto sobre el que se sigue investigando. Existe un relativo consenso en emplear esquemas conservativos basados en diferencias centradas. Sin embargo, es sabido que este tipo de esquemas pueden producir oscilaciones (*wiggles*) numéricas que pueden desestabilizar el proceso iterativo de una solución. Además, se ha encontrado que estos esquemas pueden incrementar los errores de *aliasing* en ausencia de mecanismos que disipen la energía de las pequeñas escalas [207], con un efecto mayor conforme aumenta el orden del esquema [84]. Por ello, es común encontrar cálculos con *LES* empleando esquemas de alto orden del tipo *upwind* que cumplan con alguna condición

⁵El estudio de los errores numéricos en *LES* es, por sí mismo, un campo de investigación; algunos estudios detallados pueden consultarse en [84, 38, 177].

de estabilidad⁶.

5.4. Integración temporal

El sistema de ecuaciones en *LES* que determina la dinámica del flujo turbulento es un sistema de ecuaciones diferenciales en el tiempo. La elección del esquema y paso de integración temporal (Δt) en la discretización de este sistema se determina en función de los requisitos de estabilidad numérica y precisión [190, 189].

De manera general, para la estabilidad numérica se aplican dos condiciones limitantes:

1. Para términos viscosos: $\Delta t_\nu \leq \frac{\sigma(\Delta x)^2}{\nu}$

donde σ depende del esquema de integración; para esquemas implícitos, $\sigma = \infty$.

2. Para términos convectivos: $\Delta t_{CFL} \leq CFL \frac{\Delta x}{u|_{max}}$

donde el *CFL* depende también del esquema de integración; para esquemas explícitos $CFL \leq 1$.

El criterio de precisión determina la condición de resolver la escala temporal correspondiente a la menor escala resuelta del movimiento, es decir, $\Delta t_c \leq \Delta x/U_c$, donde U_c representa la velocidad convectiva característica de las escalas resueltas.

En lo que respecta al criterio de estabilidad, en general, los esquemas implícitos son condicionalmente estables, es decir, a diferencia de los explícitos, no se ven afectados por la condición de $CFL \leq 1$. En la mayoría de los flujos, la condición viscosa impone un Δt_ν muy pequeño y usualmente se emplea un esquema implícito en la integración de este término. Asimismo, en la simulación de flujos cerca de paredes generalmente se recurre a métodos implícitos o semi-implícitos (implícito para el término viscoso y explícito para el convectivo) debido al incremento habitual de la resolución de la malla en estas zonas [70, 118].

Puesto que hay una similitud entre los criterios de estabilidad numérica y precisión ($\Delta t_{CFL} \sim \Delta t_c$) se prefiere algunas veces el uso de métodos explícitos debido principalmente a que son menos costosos en tiempo de cálculo por paso temporal y a su fácil implementación [70]. Sin embargo, en problemas donde el flujo es fuertemente influenciado por paredes o se pretende alcanzar una solución pseudo-estacionaria del flujo, los esquemas implícitos permitirán pasos de tiempo mayor y justificarían su elección [37].

En las simulaciones de esta tesis, se ha empleado en la integración temporal, el esquema implícito de tercer orden de Adam-Moulton [182] (ver Apéndice A)

5.5. Condiciones de contorno e iniciales

Para completar la descripción de un modelo físico es necesario definir las condiciones iniciales y de contorno. Un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales, tales como las ecuaciones de Navier-Stokes, describen en general un número infinito de soluciones, por tanto, son las condiciones iniciales

⁶Usualmente se requiere que cumplan la condición de “positividad” [247] o de *TVD* (*Total Variation Dimishing*) [256]. Los detalles de la implementación de estos esquemas puede consultarse en el Apéndice A; mientras que el comportamiento de algunos de ellos en la simulación de un flujo turbulento es mostrado en el Apéndice C.

y las de contorno las que dan características propias a un sistema⁷.

Puesto que las condiciones de contorno en *LES* deben ser impuestas de forma instantánea (similar a *DNS*), la especificación de entradas y salidas generalmente es más complicada que las prácticas habituales empleadas en *RANS* donde generalmente se especifican los valores medios en las variables y algunas veces los segundos momentos.

Las condiciones de contorno están determinadas fundamentalmente por la física del problema, pero también por los recursos informáticos. Dado el alto coste computacional que alcanzan algunas simulaciones de este tipo, frecuentemente es necesario reducir o confinar el dominio computacional cerca del área de mayor interés en la simulación.

5.5.1. Condición de entrada

En cuanto a las condiciones de entrada, la dificultad estriba en la forma de generar condiciones para la turbulencia realistas, puesto que en *LES*, al igual que en *DNS*, las fluctuaciones turbulentas son explícitamente capturadas y representadas por campos de velocidades transitorios. La generación o especificación de condiciones turbulentas de entrada para *LES* y *DNS*, al igual que la influencia de éstas en la predicción global del flujo, ha sido (y es) objeto de intensa investigación; de ello se han generado diversos métodos y criterios que resuelven, si no totalmente, al menos parcialmente el problema. Entre las estrategias más comunes para especificar condiciones turbulentas en la entrada se encuentran las siguientes.

- La extensión del dominio aguas arriba del área de interés, de tal manera que en ésta se hayan generado las condiciones turbulentas por la evolución o desarrollo propio del flujo. Ésta es una práctica común que, sin embargo, en situaciones donde es posible extender el dominio, tiende a elevar el coste computacional de la simulación.
- La eliminación de las condiciones de entrada (y salida) aplicando condiciones de contorno periódicas. Estas pueden ser usadas en determinados flujos turbulentos que presentan una o más direcciones de homogeneidad [189]. Son eficientes y fáciles de implementar. Sin embargo, el método está limitado a geometrías simples y pueden deformar las estructuras de flujo al forzar la periodicidad espacial [137]. El dominio debe ser al menos tan grande como la mayor estructura (número de onda) del movimiento presente en el flujo.
- La generación de condiciones turbulentas en configuraciones similares, por ejemplo, en una tubería. En este caso se pueden emplear condiciones periódicas para desarrollar el flujo turbulento y almacenar secciones de tubería para posteriormente aplicarlas a la simulación principal (ver por ejemplo [136]). Sin embargo, en los casos en que es posible emplear esta estrategia, es común que la simulación previa de donde se extraen las condiciones de contorno encarezca excesivamente el cálculo global.
- La imposición de fluctuaciones al perfil medio de velocidad en la entrada. En los casos más simples, estas fluctuaciones se generan a partir de perturbaciones aleatorias, ϑ , escaladas para satisfacer una media $\langle \vartheta \rangle = 0$, y una desviación estándar $(\vartheta')^{0,5} = 1$. Esta opción es

⁷La unicidad en las soluciones y el análisis matemático de las ecuaciones de Navier-Stokes, en especial para un flujo turbulento, van más allá de los objetivos y alcances de este documento, para un mayor detalle consultar [258, 129].

habitualmente usada por su bajo coste computacional. La perturbaciones se generan en el plano de entrada para cada celda y paso temporal. De este modo, el perfil a la entrada se calcula como $\bar{u}_i(\vec{x}, t) = \langle \bar{u}_i(x) \rangle + u_{rms} \vartheta |\vec{v}|$, donde $u_i^{rms}(x)$ es un valor esperado de fluctuación que puede obtenerse de los datos experimentales. Esta condición, sin embargo, en muchas ocasiones no posee un comportamiento físico realista ya que depende de las escalas de longitud y tiempo con las que la perturbación ϑ es generada [285]. Para solucionar esto, Lee *et al.* [126] proponen generar un perfil aleatorio en el espacio de Fourier imponiendo un espectro de energía con propiedades estadísticas acordes a datos experimentales y transformándolo inversamente en el espacio físico para el plano de entrada. Sin embargo, su implementación es complicada y no está libre de restricciones [120].

- En el mismo sentido que el punto anterior, Klein *et al.* [120] han desarrollado un método para generar perfiles de velocidades que satisfagan un tensor de esfuerzos de Reynolds, que puede obtenerse o construirse a partir de los datos experimentales, y una longitud de escala dada. El procedimiento está basado en un concepto denominado “filtros digitales” (*digital filters*) que, a grandes rasgos, consiste en la generación de fluctuaciones aleatorias condicionadas al cumplimiento de una función de correlación dada para el campo de velocidad. Sin embargo, el procedimiento sólo es eficiente en geometrías simples y mallas cartesianas. Por tal razón, recientemente, Kempf *et al.* [110] han propuesto un nuevo método, en principio, válido para geometrías y mallas arbitrarias; se basa en proporcionar la correlación en las fluctuaciones aleatorias resolviendo una ecuación de difusión que involucre a éstas. Éste es el método empleado en esta tesis.

5.5.2. Condición de salida

La estrategia habitual consiste en especificar, en el plano de salida, la condición de Neumann para la velocidad y la de Dirichlet para la presión:

$$\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial n} \right)^{sal} = 0, \quad (\bar{p})^{sal} = 0 \quad (5.15)$$

En un sentido estricto, la condición de Neumann no es válida para *LES* puesto que el campo de velocidad instantáneo es fluctuante; sin embargo, los efectos de esta condición no se propagan aguas arriba y sólo afectan un área cercana a la salida, por lo que su efecto es prácticamente nulo al alejarla del área de análisis [285].

5.5.3. Paredes

En *LES*, la presencia de paredes puede cambiar completamente el tratamiento de un flujo turbulento. Si se considera como criterio en la precisión que la malla debe ser lo suficientemente fina para resolver al menos el 80 % de la energía cinética turbulenta en cualquier parte del dominio [202, 203], la presencia de una pared sólida en la configuración puede incrementar el número de nodos a una razón de $Re^{1.76}$ [202] para conservar nivel de precisión. Por tanto, esto impone una restricción en el uso de *LES* para estas configuraciones con flujos a altos números de *Re*, como lo encontrados en aplicaciones prácticas.

La alternativa es modelar la influencia de las paredes en el flujo, lo que permite emplear mallas con menos resolución en estas zonas. Al igual que en *RANS*, es posible emplear leyes de pared; sin

embargo, esto implica introducir parámetros empíricos, en ocasiones, no del todo justificados en *LES* desde un punto de vista teórico [69]. Otra práctica común, que suele combinarse (aunque no es estrictamente necesario) con las leyes de pared, es la implementación de funciones amortiguadoras o *damping* (Ecuaciones 3.37 y 3.38) para ajustar la viscosidad turbulenta en estas zonas.

El modelado cerca de la pared es también un campo potencial de investigación en *LES* y recientemente han surgido métodos alternativos que comienzan a ser empleados. Entre estos, se encuentran por ejemplo, el denominado *DES* (*Detached Eddy Simulation*) [245] que consiste en emplear *RANS* cerca de las paredes (generalmente toda la zona de formación de la capa límite) mientras que en las regiones centrales del flujo se simula con *LES* (ver por ejemplo [44]). Otro método reciente consiste en el acoplamiento de *LES* con el modelado en las regiones cercanas a las paredes mediante *ODT* (ver por ejemplo [231]).

5.5.4. Condiciones iniciales

En flujos estadísticamente estacionarios, las condiciones iniciales son relativamente irrelevantes; en principio, pasado un tiempo determinado de integración, no ejercen influencia en las predicciones. Sin embargo, incluso en algunos de estos casos, son importantes en el comportamiento numérico de proceso de solución, sobre todo durante los primeros instantes cuando no se cumple el balance en las ecuaciones de conservación, originando oscilaciones en las variables que dificultan la convergencia del proceso de solución. Cuando no se conocen las condiciones del campo inicial, algunas prácticas habituales son la especificación de un campo previamente determinado con *RANS* o la extrapolación de las condiciones de contorno de la entrada a todo el dominio.

En casos de transición a la turbulencia, las condiciones iniciales pueden ejercer mayor influencia en las predicciones y se debe tener un mejor control sobre la especificación o generación de éstas.

5.6. Generación de tablas de flamelet y su acoplamiento en *LES*

Entre las principales ventajas, desde el punto de vista computacional, del modelo de flamelets estacionario se encuentra la posibilidad de separar el cálculo de la química del flujo, permitiendo el uso de mecanismos químicos detallados. Los estados termoquímicos son tabulados y posteriormente acoplados sin incrementar excesivamente los tiempos de cálculo.

En esta sección se describen los detalles numéricos de la generación de las tablas de interpolación (*LUT*) y su acoplamiento a *LES* para las simulaciones de esta tesis.

En la figura 5.4 se representa esquemáticamente el acoplamiento de los cálculos termoquímicos del modelo de flamelets con la simulación en *LES*. Los cálculos de los flamelets laminares son realizados *a priori* mediante el programa RUN-1DL [221, 222] para la configuración de la llama laminar a contraflujo. Los perfiles (flamelets) de los escalares termoquímicos quedan caracterizados como:

$$\psi = \psi(\xi, \chi^*). \quad (5.16)$$

El valor filtrado de los escalares químicos se puede obtener integrando estos flamelets con las *PDFs* (ver Apartado 4.6):

$$\tilde{Y}_\alpha = \int_0^1 \int_0^\infty Y_\alpha(\xi, \chi^*) \tilde{P}_\chi^s(\chi^*) \tilde{P}_\xi^s(\xi) d\chi^* d\xi, \quad (5.17)$$

donde $\tilde{P}_\chi^s(\chi^*)$ y $\tilde{P}_\xi^s(\xi)$ son las funciones de densidad de probabilidad filtradas de Favre (*FDF*) de

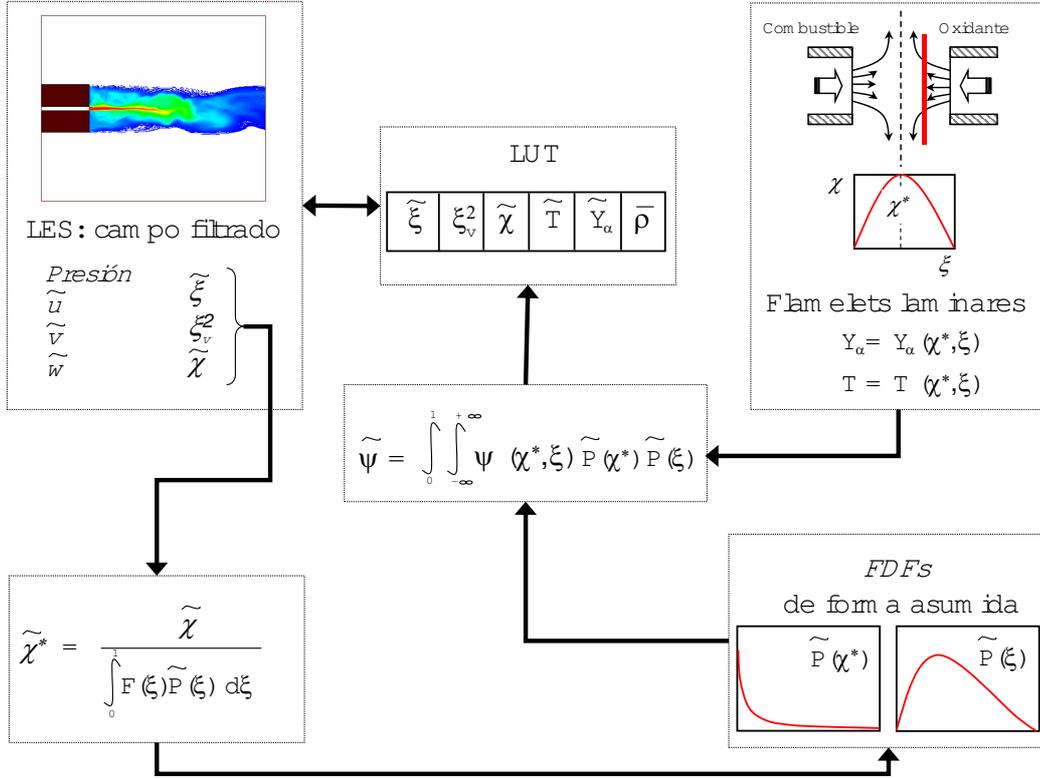


Fig. 5.4: Esquema del acoplamiento entre los cálculos de modelo flamelet, su integración y acoplamiento con *LES*.

la tasa de disipación χ^* y de la fracción de mezcla ξ , respectivamente. En este trabajo se supone la forma de estas funciones, tomando para la *FDF* de ξ una función β (Ecuación 4.37) caracterizada por el valor filtrado $\tilde{\xi}$ y su varianza ξ_v^2 ; determinadas ambas en cada celda del dominio durante la simulación principal. Para χ^* se supone una distribución lognormal, Ecuación (4.40), caracterizada por su valor filtrado $\tilde{\chi}^*$. Puesto que en la simulación del flujo la variable que se modela es $\tilde{\chi}$, para obtener $\tilde{\chi}^*$ se supone en el flujo turbulento la misma dependencia (Ecuación 4.32) que existe en la configuración a contraflujo [43, 42, 49], con lo que el valor filtrado $\tilde{\chi}^*$ se determina como:

$$\tilde{\chi}^* = \frac{\tilde{\chi}}{\int_0^1 F(\xi) \tilde{P}_\xi^s(\xi) d\xi}. \quad (5.18)$$

El proceso de creación de las tablas de interpolación y su posterior consulta puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Generación de flamelets laminares:

- Elegir los puntos de discretización en ξ .
- Seleccionar rango de valores para χ^* ($\chi^* \rightarrow 0$ hasta χ_q^*).
- Resolver ecuaciones de flamelet estacionarias (4.26) y (4.27) para cada χ^* .
- Almacenar perfiles.

2. Integración de perfiles y generación de *LUT*

- Elegir valores de $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$.
- Determinar $\tilde{\chi}^*$ a partir de la expresión (5.18).
- Resolver la integral (5.17) y tabular resultados termoquímicos para conjunto de $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$.

3. Lectura de tablas

- Se accede a tabla en cada celda e iteración con $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$; mediante triple interpolación se determina el estado termoquímico que se transmite a la simulación.

5.7. Integración del modelo S-LEM en LES

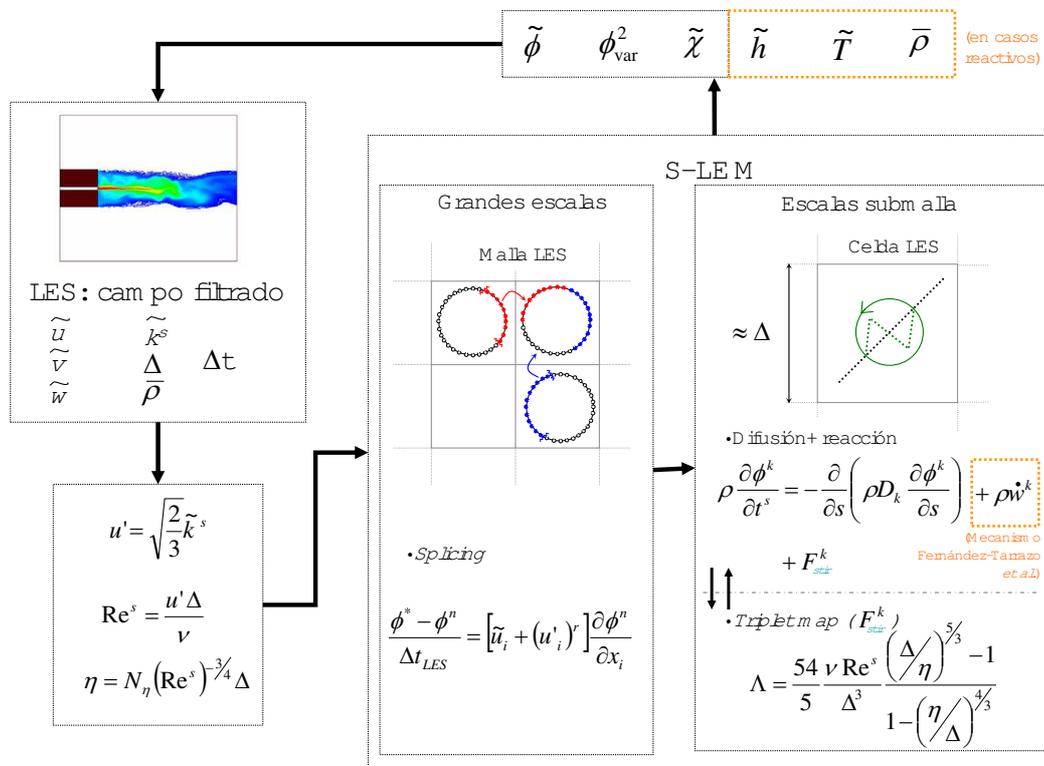


Fig. 5.5: Esquema del acoplamiento entre S-LEM y LES. Cada proceso involucrado en el acoplamiento evoluciona numéricamente de acuerdo a su propia escala de tiempo

Tal y como se ha mencionado en el Apartado 4.7, el modelo S-LEM separa el tratamiento de los procesos de acuerdo al tamaño de las escalas, tomando como referencia el filtro de LES. Sin embargo, los campos submalla, modelados con las estrategias desarrolladas por Kerstein [112, 113, 114, 115], son influenciados tanto por la convección de gran escala como por los procesos que se desarrollan en las escalas submalla. Dentro de cada celda en LES, se calculan en un dominio unidimensional el mezclado turbulento y la difusión de las escalas no resueltas. En caso de que se trate de un escalar reactivo, también se incluye su respectivo término fuente. No existe una dependencia direccional asociada al dominio 1D; por tanto, éste puede considerarse como una curva variando en el espacio y tiempo y alineada al gradiente local del escalar [148]. El rango de escalas modeladas por este dominio está definido entre una longitud representativa del tamaño

de la celda, el filtro Δ en *LES*, y la escala relevante más pequeña, generalmente la escala de Kolmogorov, η . Si el ratio de escalas está definido como $N = \Delta/\eta$, la información submalla de un escalar en cada celda podría representarse mediante una matriz unidimensional de tamaño N . En *DNS*, para este mismo ratio de escalas, el tamaño de las matrices escalaría como N^2 y N^3 , en 2D y 3D respectivamente. Por tanto, hay una evidente economía de *S-LEM* con respecto a *DNS* en predicciones similares.

En esta sección se presentan los detalles numéricos del acoplamiento de *S-LEM* al código principal de *LES*. La formulación presentada en esta tesis involucra, por tanto, la ejecución simultánea e independiente de los procesos submalla en un dominio unidimensional inmerso en cada celda computacional de *LES*. El rango de las escalas del mezclado turbulento submalla es reproducido de acuerdo a la cascada de Kolmogorov, empleando una distribución de torbellinos que simula este comportamiento (Ecuación 4.60), con parámetros como el número de Reynolds como datos de entrada. En la figura 5.5 se muestra el esquema del acoplamiento e interacciones entre *S-LEM* y *LES*. Cada proceso involucrado evoluciona numéricamente de acuerdo a su propia escala de tiempo. Los pasos en el acoplamiento son los siguientes:

1. La evolución del campo de variables en *LES*, corresponde a la evolución del campo de variables en *LES*.
2. La convección de grandes escalas del dominio de *S-LEM* (*splicing*).
3. Los procesos submalla:
 - a) difusión,
 - b) reacción (si aplica) y
 - c) convección o mezclado turbulento submalla *triplet map*.

5.7.1. Convección de las grandes escalas (*splicing*)

Las rutinas que componen el modelo *S-LEM* son acopladas a la simulación de *LES* en cada paso temporal. El primer proceso que se activa es el de la convección o *splicing* entre celdas vecinas de los campos submalla. Este proceso es gobernado por las grandes escalas capturadas por la malla de *LES* y, por tanto, se realiza de acuerdo con parámetros calculados directamente en la simulación principal. El algoritmo de *splicing* transporta elementos del dominio submalla de una celda a otra, con una frecuencia determinada por un tiempo convectivo Δt_{conv} . El número de elementos está determinado por el gasto másico, estimado a partir del campo de velocidades resuelto en las caras de las celdas más una componente fluctuante determinada a partir de k^s (ver Apartado 4.7.2). La adición de esta componente turbulenta incrementa el transporte del escalar entre celdas; su contribución es incorporada como un intercambio de elementos entre la celda receptora y donante (ver figura 5.6); el mismo número de elementos que salen de la celda donante por fluctuación son devueltos por la celda receptora de manera que el flujo medio no se vea afectado por las fluctuaciones. En resumen, el proceso de *splicing* consiste de las siguientes etapas:

1. Cálculo de gastos másicos y número de elementos a transportar en las caras de las celdas a partir del campo de velocidades resuelto y de las fluctuaciones turbulentas.

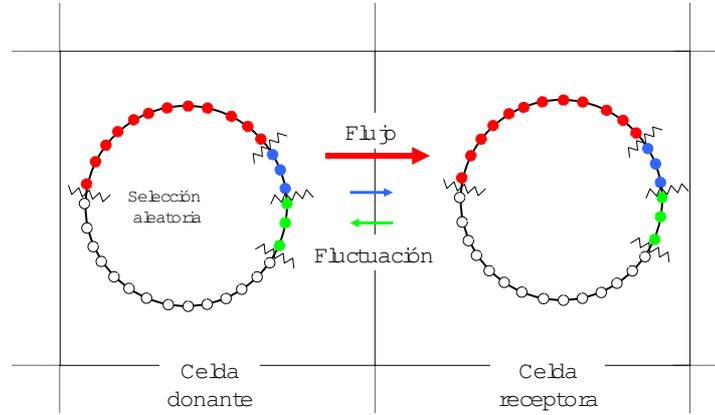


Fig. 5.6: Ilustración esquemática del algoritmo de splicing. En cada Δt_{LES} , elementos del subdominio de 1D son copiados entre celdas vecinas para contabilizar el transporte de las grandes escalas. Las flechas indican las componentes del flujo convectivo

2. Identificación de celdas donantes y receptoras de acuerdo al vector velocidad.
3. Selección de los elementos a transportar en la celda donante e inserción de los mismos en la receptora. La porción transportada es seleccionada e insertada aleatoriamente⁸.

Aunque el transporte de elementos entre celdas puede dar origen a fuertes discontinuidades en el campo submalla que pueden afectar la predicción de gradientes submalla en el escalar, la diferencia de frecuencias entre las grandes escalas y los procesos submalla elimina prácticamente este efecto [148, 237].

5.7.2. Procesos submalla: difusión, reacción y *triplet map*

La Ecuación 4.57 representa una ecuación de reacción-difusión (o sólo de difusión en el caso escalares inertes) con el término extra F_{stir}^k :

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \phi^k}{\partial t^s} = - \frac{\partial}{\partial s} \left(\rho D \frac{\partial \phi^k}{\partial s} \right)}_{\text{Parte difusiva}} + \underbrace{\rho \dot{w}^k}_{\text{Parte reactiva}} + \underbrace{F_{stir}^k}_{\text{Mezclado submalla}} .$$

Esta ecuación es discretizada mediante diferencias finitas en un dominio unidimensional de longitud $s = \Delta$. El proceso de difusión evoluciona con un paso temporal Δt dado por la Ecuación (4.59). Si el escalar es reactivo, el término químico determinado mediante el mecanismo de un paso (Apartado 4.8.3) se agrega a la ecuación. El término F_{stir}^k , que representa la convección o mezclado (*stirring*) submalla, es modelado mediante los procesos estocásticos de *triplet map* gobernados por su propia escala temporal $\Delta t_{F_{stir}^k}$ obtenida mediante la Ecuación (4.61). Cuando el tiempo acumulado del proceso de difusión-reacción coincide con el del mezclado turbulento,

⁸En la implementación de esta tesis, los elementos se toman secuencialmente a partir de una posición inicial seleccionada aleatoriamente, evitando que una misma porción sea transportada o reemplazada más de una vez.

la evolución en la ecuación unidimensional se interrumpe, dando lugar a un evento estocástico de *triplet map*. Cada evento es interpretado como la acción de un torbellino de tamaño l sobre el campo unidimensional. El proceso de *triplet map* consiste en crear tres copias del segmento l , comprimir cada copia por un factor de tres, revertir el segmento medio e insertar las tres copias en el campo original. El efecto de este proceso es incrementar los gradientes espaciales a través de la compresión del segmento l . Matemáticamente, la aplicación de este proceso transforma un escalar $c(x, t_0)$ a $\hat{c}(x, t_0)$ de acuerdo al siguiente algoritmo [114]:

$$\hat{c}(x, t_0) = \begin{pmatrix} c(3x - 2x_0, t_0) & x_0 \leq x \leq x_0 + \frac{1}{3}l \\ c(-3x + 4x_0 + 2l, t_0) & x_0 + \frac{1}{3}l \leq x \leq x_0 + \frac{2}{3}l \\ c(3x - 2x_0 - 2l, t_0) & x_0 + \frac{2}{3}l \leq x \leq x_0 + l \\ c(x, t_0) & \text{para el resto de casos} \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

donde l es el tamaño del torbellino obtenido aleatoriamente a partir $f(l)$, x_0 es la posición (aleatoria) inicial del segmento en el dominio 1D y t_0 es el tiempo en el que se produce el evento; estos tres parámetros se calculan de acuerdo a lo descrito en la Sección 4.7.

Cuando los procesos de *S-LEM* se han desarrollado en un tiempo igual a Δt_{LES} , el modelo devuelve el equivalente al valor filtrado del escalar para ese paso temporal, obtenido directamente del promediado ponderado con la densidad en cada subdominio unidimensional, y cualquier otra estadística relacionada con el campo submalla; por tanto, no es necesario resolver ecuaciones de transporte a nivel de *LES* para la evolución de los escalares presentes en el subdominio de *S-LEM*.

5.7.3. Discretización submalla

El número total de elementos, N_{LEM} , en los que se discretiza la longitud del dominio s en cada celda de *LES* es determinado de manera que todas las escalas energéticas submalla sean resueltas (en el rango $\Delta - \eta$). Puesto que la discretización debe capturar la escala de Kolmogorov, el espacio entre nodos debe ser al menos $\delta s \geq \eta/2$ [228]. La escala de Kolmogorov se obtiene a partir de la relación de escalas:

$$\frac{\Delta}{\eta} = (Re^s)^{\frac{3}{4}} = \left(\frac{\sqrt{k^s \Delta}}{\nu} \right)^{\frac{3}{4}}. \quad (5.20)$$

Sin embargo, dado que son necesarios al menos 6 elementos para modelar un torbellino o evento de *triplet map* de tamaño igual a la escala más pequeña η [112], el espacio entre nodos debe ser al menos de $\eta/6$; con lo que el número total de elementos debe ser al menos [31]:

$$N_{LEM} = 6 (Re^s)^{3/4}. \quad (5.21)$$

La relación (5.21) y el uso de mallas con espaciado no uniforme implicaría un tamaño s y un número variable de elementos para cada celda de *LES* lo que complicaría el algoritmo de *splicing*. Por esta razón, se ha elegido un número de elementos n_{LEM} constante para todas las celdas de *LES* y suficiente para que se cumpla la relación (5.21) en la mayoría de éstas, principalmente

en las zonas de interés. De hecho, en las zonas donde no se cumpliera esta relación, el efecto podría despreciarse: aun cuando el espaciado no fuera suficiente para modelar un torbellino que aleatoriamente tuviera el tamaño η , el impacto se reflejaría en una reducción del rango efectivo de escalas en los torbellinos modelados (Δ - η) pero la difusividad turbulenta no cambiaría [226]. Lo anterior, puede expresarse matemáticamente modificando la expresión (5.20) para el rango efectivo de escalas como:

$$\frac{\eta}{\Delta} = N_\eta (Re^s)^{-\frac{3}{4}}, \quad (5.22)$$

siendo N_η una constante cuyo valor puede estar entre 1 y 13 [239, 64] lo que permite no elevar excesivamente las necesidades de discretización del subdominio de LEM.

5.8. Evaluación de las predicciones en *LES*

Al margen de las técnicas de filtrado implícito en *LES* (ver [224] para detalles), la práctica general es relacionar el espaciado de la malla h con la longitud del filtro Δ . Con ello, el modelado queda directamente relacionado a la malla y, de manera indirecta, al flujo considerado [203]. Esta dependencia de las predicciones en la malla tiene que ser evaluada para minimizar su impacto en los resultados.

El método habitual para juzgar la dependencia de los resultados en la malla consiste en variar la resolución espacial para posteriormente comparar los resultados y evaluar su impacto. Sin embargo, este procedimiento no cuantifica la cantidad de energía cinética turbulenta que captura la malla y la parte que es modelada. Una evaluación de malla en función de estas cantidades se efectúa determinando “índice de calidad en *LES*” con la siguiente expresión [202, 203]:

$$M(\vec{x}, t) = \frac{k^s(\vec{x}, t)}{k^s(\vec{x}, t) + K(\vec{x}, t)}, \quad (5.23)$$

donde $k^s(\vec{x}, t)$ representa la energía cinética turbulenta de las escalas submalla y $K(\vec{x}, t)$ es la energía cinética turbulenta de las escalas resueltas. El valor $M(\vec{x}, t)$ varía en el intervalo $[0,1]$ e indica en cada punto e instante una medida de la resolución de la turbulencia: $M(\vec{x}, t)=0$ correspondería a *DNS* y $M(\vec{x}, t)=1$ a *RANS*. $K(\vec{x}, t)$ se calcula como:

$$K(\vec{x}, t) = \frac{1}{2}(\tilde{u}_i - \langle u_i \rangle)^2; \quad (5.24)$$

$k^s(\vec{x}, t)$, en el caso de no utilizar la ecuación de transporte (3.57) (modelo de una ecuación), puede estimarse como:

$$k^s(\vec{x}, t) = \left(\frac{\nu_t}{C\Delta} \right)^2, \quad (5.25)$$

con $C \approx 0,1$ [202].

5.9. Conclusiones

En este capítulo se han presentado los detalles numéricos para la solución del sistema de ecuaciones en *LES*, presentadas en las Capítulos 3 y 4, así como lo relativo a la implementación de los modelos empleados en esta tesis y su acoplamiento al flujo turbulento. Para dar solución a las ecuación filtradas que describen la dinámica del flujo turbulento se discretizan las ecuaciones

mediante el método de volúmenes finitos. Se emplean esquemas de alto orden para la integración del término convectivo y la integración temporal se realiza mediante un esquema totalmente implícito con tercer orden de precisión. Se ha descrito la implementación del modelo de flamelet laminar donde los cálculos termoquímicos y su posterior integración con las funciones de densidad de probabilidad filtradas se realizan *a priori* para posteriormente acoplarse a la simulación principal mediante tablas de interpolación. Para el modelo *S-LEM* se ha descrito el acoplamiento e interacción numérica de los procesos que intervienen. Mediante subrutinas externas se incorporan al programa principal los esquemas de discretización, el modelado de la turbulencia, la lectura de tablas, el modelo *S-LEM* y el cálculo de estadísticas globales del flujo.

Capítulo 6

Llamas turbulentas pilotadas de difusión: consideraciones preliminares del modelado

En los últimos años ha habido un importante progreso en la investigación numérica de la combustión gracias a la disponibilidad de quemadores, llamas y geometrías experimentales adecuadamente documentados que se han empleado para la validación de predicciones numéricas. En esta tesis se han seleccionado un conjunto de llamas turbulentas de metano y aire, estabilizadas mediante una corriente piloto, cuya configuración experimental fue diseñada en la Universidad de Sidney [144, 146]. Los datos de los experimentos están disponibles a través del *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames (TNF)* [173]. Las configuraciones son las denominadas como C, D y E. La geometría del quemador es la misma en los tres casos; sin embargo la velocidad del chorro y de la corriente piloto se va incrementando entre ellas y, por tanto, también la probabilidad de extinción local en el flujo. Los datos experimentales incluyen mediciones de velocidad, temperatura y principales escalares químicos. Adicionalmente, una de las principales razones que justifican la selección de estas llamas es la disponibilidad de mediciones experimentales de la tasa de disipación de la fracción de mezcla. En este capítulo se describen las principales características de las llamas analizadas y se evalúa el comportamiento de los esquemas y modelos numéricos más relevantes.

6.1. Configuración experimental

La configuración seleccionada para la validación de los modelos y esquemas presentados en los anteriores capítulos es una llama pilotada de metano-aire, clasificada como un sistema no premezclado. La geometría del quemador ha sido diseñada en la Universidad de Sidney y caracterizada

experimentalmente para diferentes números de Reynolds y combustibles [144, 145, 146]. Los estudios más recientes se han centrado en una geometría en particular, con la mezcla aire-metano como combustible y con diferentes velocidades para las corrientes. Incrementando estas velocidades (número de Reynolds del flujo), la probabilidad de extinción local en la llama aumenta [10, 232]. Estas configuraciones experimentales son denominadas por el laboratorio Sandia como llamas C, D, E y F ¹. La información detallada del quemador y los resultados experimentales están disponibles a través de sitio web del *International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames² (TNF)* [173]. Estas llamas han sido objeto de numerosos estudios numéricos, pues sus características las hacen atractivas para validar modelos tanto simples como complejos. La configuración puede clasificarse dentro de los sistemas no premezclados. La geometría es relativamente simple y consiste en una corriente axisimétrica (*jet*) que sale a través de una boquilla con pared delgada que, a su vez, está dentro de un anillo concéntrico por donde fluye una llama premezclada que hace la función de piloto. Los gases a alta temperatura de la corriente piloto estabilizan la llama cerca de la boquilla donde las velocidades de la corriente del combustible tienden a producir extinción local en la llama; conforme aumentan las velocidades de las corrientes, mayor es la probabilidad de que este fenómeno ocurra. La boquilla del combustible tiene un diámetro, D_{jet} , de 7.2 mm; el de la boquilla del piloto, D_{pil} , es 18.2 mm. En todos los casos, el quemador está inmerso en coflujo laminar de aire a una velocidad de 0.9 m/s. El combustible es una mezcla en volumen de tres partes de aire por una de metano. Este premezclado parcial con aire reduce la longitud de la llama haciéndola más estable y robusta que las llamas con CH_4 , puro o diluido con nitrógeno, por lo que la configuración puede operarse a números de Reynolds razonablemente altos sin incrementar excesivamente la probabilidad de extinción [173]. Por otro lado, las tasas de mezclado son lo suficientemente elevadas para que la combustión en la llama se comporte como un sistema de difusión o no premezclado. Las condiciones de la corriente piloto han sido ajustados de manera tal que la composición sea equivalente a la producida por la combustión de una mezcla de combustible y aire con una fracción de mezcla de 0.27. Los escalares medidos experimentalmente (*Raman scattering* y *LIF*) incluyen las especies químicas N_2 , O_2 , H_2 , CH_4 , CO , CO_2 , OH , y NO ; la temperatura y la fracción de mezcla. Las componentes radial y axial de la velocidad, para las llamas D, E y F, fueron medidas por la *Technical University of Darmstadt* (anemometría laser-Dopler) [232]. Los datos incluyen medias (Reynolds y Favre), fluctuaciones (*rms*) y estadísticas condicionadas. Para el análisis de esta tesis, se han seleccionado las configuraciones C, D, y E, ya que además poseen mediciones experimentales de la tasa de disipación de la fracción de mezcla [106, 107, 8]. Las principales características de las corrientes de entrada para estas llamas se muestran en la Tabla 6.1.

6.2. Antecedentes

Esta configuración ha sido ampliamente estudiada y caracterizada experimentalmente, lo que la ha convertido en objeto de numerosos trabajos numéricos. Los resultados experimentales incluyen mediciones y valores estadísticos tales como promediados de Reynolds, Favre y condicionados, así

¹Existen también las llamas A (régimen laminar) y B (transición) que, al no ser turbulentas, quedan fuera de los análisis.

²El propósito del *TNF* es facilitar la comparación de resultados numéricos y experimentales de algunas llamas turbulentas seleccionadas.

Tabla 6.1: Parámetros de las corrientes de entrada para las llamas C, D y E

Corriente	Condiciones		
Combustible	C	D	E
	$U_{jet}=29.7$ m/s,	49.6 m/s,	74.4 m/s.
	$Re_{jet}=13400$,	22400,	33600.
	$D_{jet}=7.2$ mm.		
	$\xi_{st}=0.351$.		
Piloto	$T_{jet}=294$ K.		
	25 % metano/75 % aire (volumen).		
	$U_{pil}=6.8$ m/s,	11.4 m/s,	17.1 m/s.
	$D_{pil}=18.2$ mm.		
Coflujo	$\xi_{pil}=0.27$.		
	$T_{pil}=1880$.		
	$U_{cof}=0.9$ m/s.		
	$T_{cof}=291$ K.		

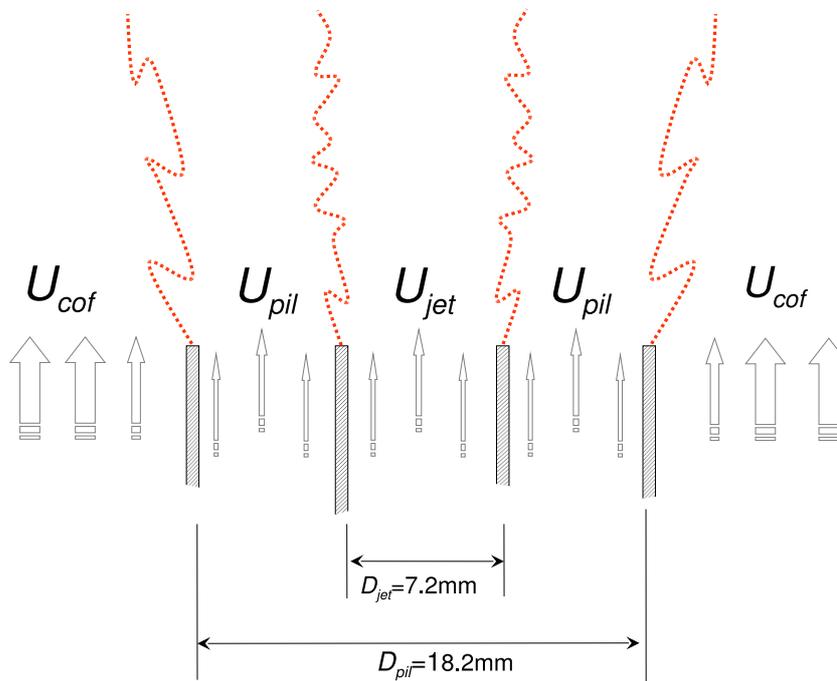


Fig. 6.1: Llamas C, D y E. Diagrama esquemático de las corrientes de entrada del quemador.

como fluctuaciones medias (*rms*) del campo de velocidad [232], escalares químicos [10] y tasa de disipación de la fracción de mezcla [106]. Recientemente se han publicado estudios más detallados

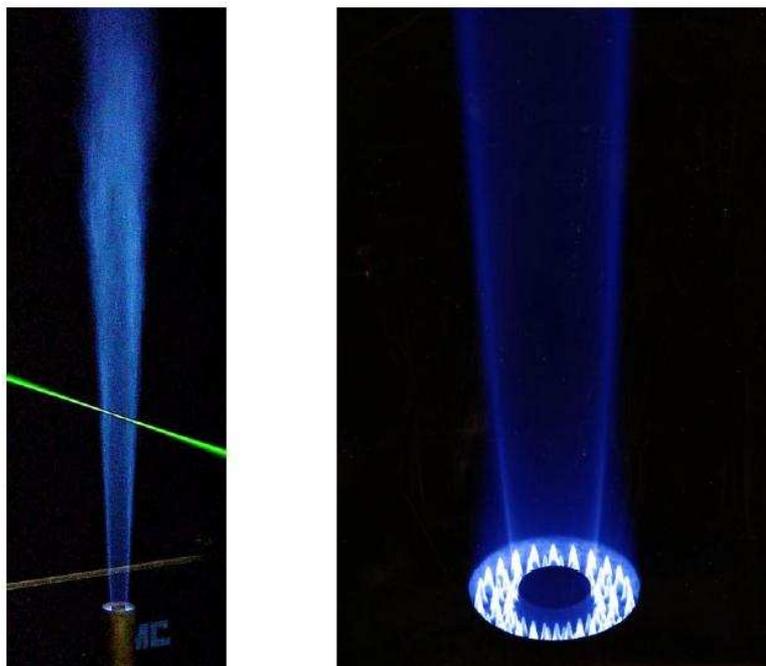


Fig. 6.2: Imagen real de la llama pilotada de difusión (fuente: [173]).

en torno a las estructuras y escalas de la tasa de disipación para las configuraciones C, D, y E [107, 8].

El quemador forma parte de una serie de configuraciones seleccionadas por el *TNF* como casos para la validación de modelos de mezcla, turbulencia y combustión. En este marco, los estudios numéricos tanto en *RANS* como en *LES* sobre esta llama son abundantes y pueden consultarse en las memorias del *workshop* [173]. En cuanto a publicaciones, la llama D es la que más frecuentemente se ha empleado, dada su baja probabilidad de extinción local y su relativamente alto número de Reynolds³ [173]. En el ámbito de *RANS*, Romina y Bilger [223] han empleado el modelo *CMC* con un mecanismo “*skeletal*” a partir del *GRI* 2.11 [238] para el metano y el mecanismo de Miller-Bowman [153] incluyendo un modelo para la radiación. Este trabajo señala los inconvenientes de los mecanismos reducidos en la predicción de radicales como el *NO*. Las técnicas basadas en *RANS* con una ecuación de transporte para la *PDF* empleando métodos de Monte Carlo también han sido frecuentemente usadas. En el trabajo de Xu y Pope [288], un mecanismo de 16 especies (*ARM*) ha sido incorporado usando el algoritmo *ISAT* [201]. De igual naturaleza es el trabajo de Lindstedt *et al.* [134] pero usando un mecanismo químico más complejo para las llamas B, D y F con resultados que, en general, concuerdan con las mediciones experimentales. Raman *et al.* [208] presentan resultados usando el mecanismo *GRI* 2.11 y empleando igualmente una técnica híbrida de volúmenes finitos y transporte de partículas para la *PDF*. Wang y Chen [273] usan el mecanismo de 53 especies *GRI* 3.0 prediciendo el flujo adecuadamente pero resaltando la conveniencia de usar modelos de mezcla más sofisticados en el transporte de la a *PDF*.

³A juicio de algunos autores, la llama D es quizá la llama turbulenta que más ha sido investigada tanto experimental como numéricamente [109].

En el año 2000, en el cuarto *workshop TNF*, se presentó la primera simulación tridimensional en *LES* de esta configuración empleando un modelo Smagorinsky estándar y flamelets estacionarios. A partir de entonces han comenzado a publicarse análisis mediante *LES*. Bushe y Steiner adaptaron el modelo *CMC* con un mecanismo químico de dos pasos [251, 252]. Este mismo grupo de investigación simuló la llama empleando un modelo lagrangiano de flamelets transitorios obteniendo mejores resultados, pero con tiempos de cómputo mucho más elevados que las predicciones anteriores [196, 192, 193]. Más recientes son los trabajos que usan el método de la función de densidad de probabilidad filtrada (*FDF*). Sheikhi *et al.* [235] han utilizado un método híbrido entre diferencias finitas y Monte Carlo empleando un dominio espacial reducido de la llama D. La química es introducida por medio de un modelo de flamelets y el mecanismo *GRI 2.11*. En general, los valores promediados de la simulación concuerdan adecuadamente aunque las fluctuaciones resultan excesivas cuando se introduce la contribución submalla. Kempf *et al.* [109] han analizado las escalas y estructura de la tasa de disipación empleando mallas con una resolución similar a la empleada con los puntos de medición en los experimentos; la química es representada por un modelo de flamelets estacionario, implementado a través de redes neuronales. Los resultados concuerdan con las observaciones experimentales y justifican la validez e idoneidad del modelo de flamelets dado su bajo coste computacional en relación a otras estrategias. Navarro-Martinez *et al.* [166] han empleado un modelo *CMC* para la combustión con una *PDF* β para la distribución del escalar. El trabajo compara los valores de la tasa media de disipación del escalar extraídos de la simulación con los datos experimentales con un aceptable acuerdo, demostrando la capacidad de *LES* para capturar las variaciones de esta importante variable en los fenómenos de combustión turbulenta. Mustata *et al.* [162] han empleado un método euleriano de transporte para la *PDF* conjunta de los escalares químicos. En la simulación se han empleado modelos submalla simples y un mecanismo global de 4 pasos [105]. Las predicciones muestran que es posible emplear un número reducido de campos estocásticos sin perder precisión en los resultados. Recientemente, Ihme y Pitsch [98] adaptan un modelo basado en flamelets y una variable de progreso que considera momentos de alto orden e información de las escalas temporales [97]. El modelo ha sido aplicado en la simulación de las llamas D y E con buenos resultados. En la misma línea de los modelos de flamelets, Vreman *et al.* [270] han comparado predicciones considerando diferentes condiciones en la generación de los flamelets, premezcladas y no premezcladas, para las llamas D y F. Los resultados para ambas condiciones son similares y confirman la conveniencia del modelo de flamelets para la llama D; por el contrario, en la F no es capaz de capturar la extinción local presente en esta llama.

En este trabajo se emplea, por primera vez para esta llama, la técnica de *Linear Eddy Model* como modelo submalla, referido en esta tesis como *S-LEM*, para modelar el transporte de la fracción de mezcla y la combustión. De acuerdo al tipo de modelado, los cálculos numéricos pueden clasificarse como:

1. Simulaciones acoplando *LES* con flamelets estacionario como modelo de combustión y *S-LEM* para el transporte de un escalar no reactivo (fracción de mezcla);
2. Simulaciones acoplando *S-LEM* como modelo de combustión a *LES*.

Los fundamentos teóricos y el proceso de acoplamiento de los modelos se han descrito en los capítulos iniciales. En las siguientes secciones de este capítulo se presentan estudios y análisis

numéricos previos a los cálculos y resultados principales, que complementan los detalles numéricos considerados en esta tesis.

6.3. Dominio y malla computacional

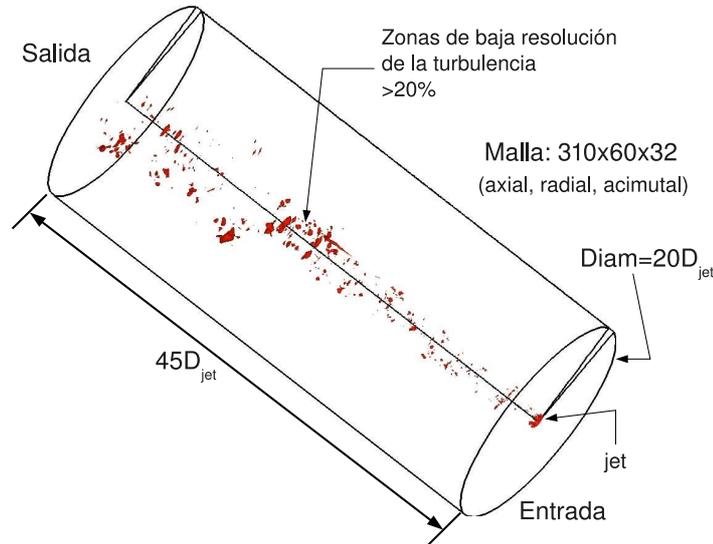


Fig. 6.3: Dominio computacional empleado e índice de calidad en las tres configuraciones.

La ecuaciones que gobiernan el flujo turbulento han sido discretizadas en una malla cilíndrico-polar de 32 x 60 x 310 celdas en dirección acimutal, radial y axial⁴, respectivamente, en un dominio computacional con un diámetro de $20D_{jet}$ y una longitud axial de $45D_{jet}$. El dominio incluye las tres posiciones donde existe información experimental de la tasa de disipación de ξ : $7.5D_{jet}$, $15D_{jet}$ y $30D_{jet}$. En la Figura 6.3 se muestra un diagrama del dominio empleado para las tres llamas analizadas en esta tesis. En la zona central, de manera ilustrativa, se han señalado pequeños volúmenes donde el índice de calidad de *LES* [202, 203], determinado para la llama D de acuerdo con la expresión (5.23) (ver Apartado 5.8), es superior a 0.20. En otros términos, estos volúmenes representan zonas donde el modelado de la energía cinética de la turbulencia representa más del 20% de la energía cinética total⁵. Este criterio sugiere que en una predicción con *LES*, este índice no debería superar el valor de 0.2 en la mayor parte del dominio para asegurar que el filtrado de las escalas se produce en el último tercio del rango inercial en la cascada de energía (ver Figuras 3.1 y 3.2). Como se muestra en la Figura 6.4 el valor máximo de este índice es de 0.33 para la llama E, la configuración con el número de Reynolds más alto, y se mantiene por debajo de 0.20 en la mayoría del dominio en las tres llamas. Este índice depende del valor local de la intensidad de la turbulencia en cada instante de tiempo; por tanto, considerando las complicaciones numéricas de introducir un algoritmo para el refinamiento local de la malla en cada paso temporal, el valor

⁴La sensibilidad de los resultados a la malla se verificó inicialmente cambiando la resolución de ésta, adoptando el criterio de mantener un balance adecuado entre exactitud de los resultados y tiempo de cómputo, considerando principalmente el alto coste computacional del modelo *S-LEM*.

⁵Conviene recordar según lo expuesto en la Sección 5.8 que un valor en el índice de calidad de 1.0 (100% modelado) significa que la calidad de la simulación está más próxima a *RANS*; por el contrario, un valor de 0.0 (0% modelado) equivaldría a *DNS*.

puede considerarse satisfactorio.

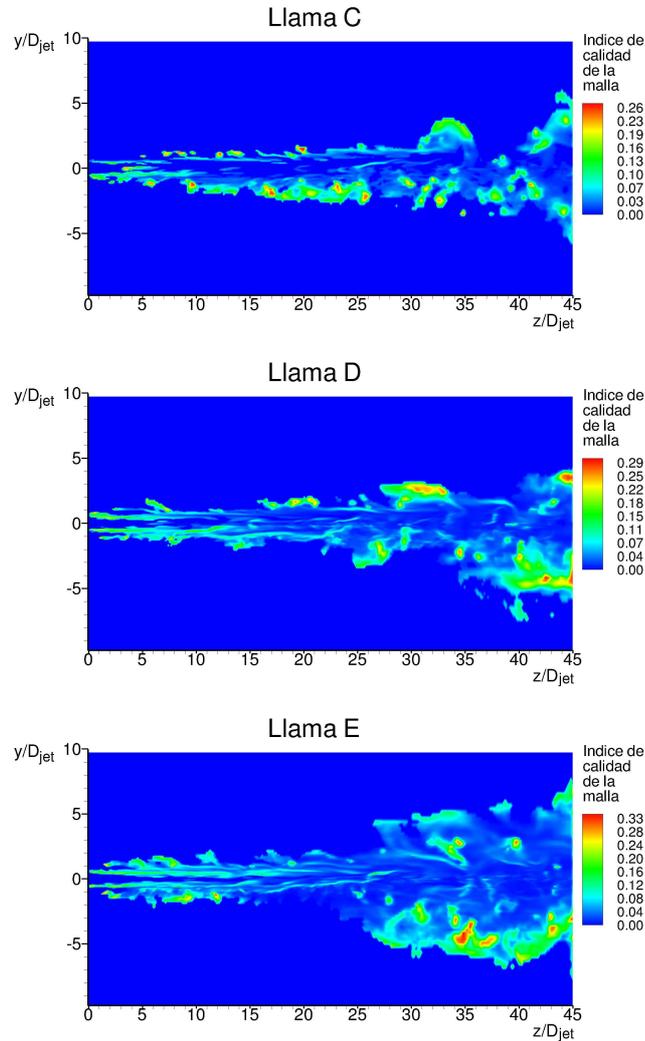


Fig. 6.4: Llamas C, D y E; *LES* (Ecuación k^s) y flamelets. Índice de calidad de la malla para las tres configuraciones estudiadas.

6.4. Modelado en *LES*

Tal y como se ha señalado en el capítulo 5, las ecuaciones filtradas se han discretizado y resuelto en un código de volúmenes finitos [186] con una formulación implícita en el tiempo y paralelizado mediante subrutinas de MPI. En la discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento se ha empleado un esquema de diferencias centradas (*CDS*). Dada la importancia de la fracción de mezcla en el cálculo de la termoquímica, este escalar debe estar debidamente acotado y libre de las oscilaciones numéricas propias de un esquema *CDS*. Por tanto, para la fracción de mezcla y el resto de escalares resueltos se ha empleado un esquema no lineal *TVD* (SMART, ver Apéndice A) que mantiene que mantiene un orden de aproximación al menos de dos [275, 276, 277]. El uso de esquemas *upwind* de alto orden para la fracción de mezcla

es frecuente en *LES* de flujos reactivos; este procedimiento ha sido usado por ejemplo en las referencias [196, 23, 109, 162]. Las ecuaciones de transporte son integradas en el tiempo con el esquema implícito de Adam-Moulton [182] con una aproximación de orden tres. El efecto que tiene este esquema en los resultados se puede observar en la Figura 6.5; mejorando principalmente la predicción de la componente axial de la velocidad. En el caso de los escalares, el efecto es menor debido probablemente a la combinación con el esquema tipo *upwind*. Conviene, asimismo, aclarar que los cálculos para la evaluación de este esquema se han efectuado con el modelo de Smagorinsky convencional y, como se verá en las siguientes secciones, no son parte de las simulaciones principales.

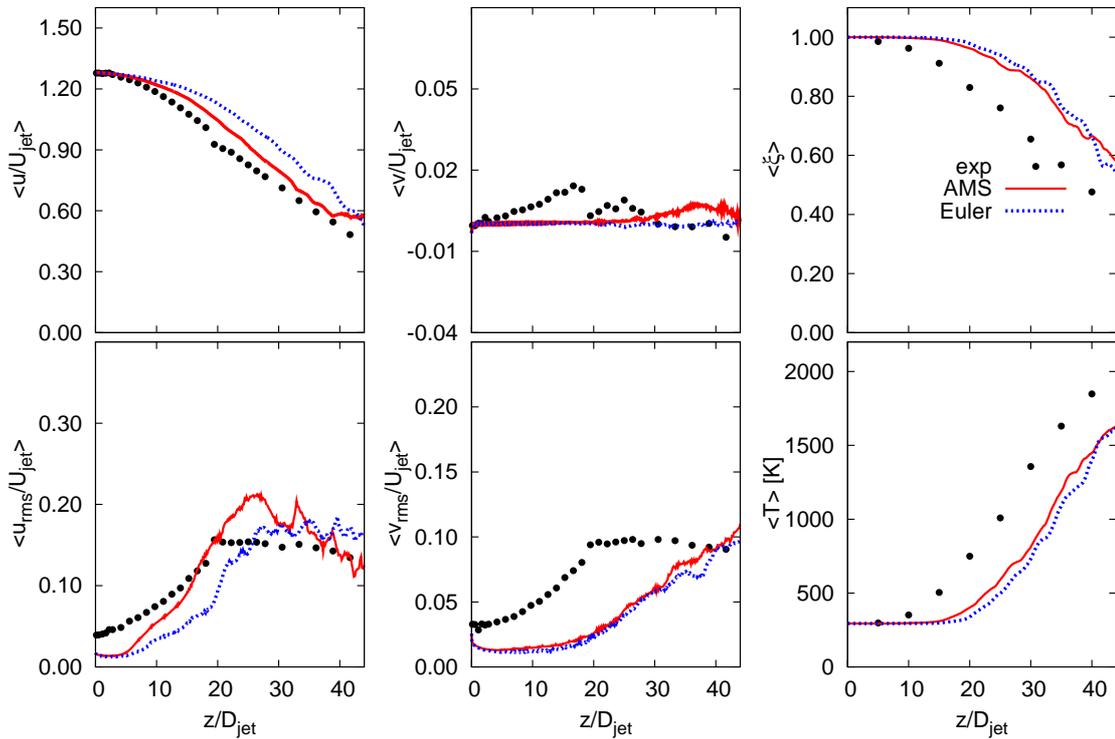


Fig. 6.5: **Llama D**; *LES* (Smagorinsky) y *flamelets*. Perfiles de las componentes axial y radial de la velocidad (media y *rms*), fracción de mezcla y temperatura (media) en el eje central producidos por los esquemas implícitos Euler (primer orden) y Adam-Moulton (tercer orden).

El cuanto al modelo submalla en las ecuaciones de cantidad de movimiento, inicialmente se evaluaron cinco opciones⁶:

1. Smagorinsky convencional,
2. Smagorinsky-Lilly,
3. *RNG*-Smagorinsky,
4. una ecuación para la energía cinética submalla k^s y
5. *WALE*.

⁶Los modelos pueden consultarse en el Apartado 3.6.

Los parámetros en todos los modelos se han mantenido constantes. En el caso de la fracción de mezcla y demás escalares resueltos se ha recurrido a la hipótesis de la difusión por gradiente con $Sc_t=0.4$ (ver Sección 4.3).

En la Figura 6.6 se muestran los perfiles axiales generados con los distintos modelos y los correspondientes valores experimentales. La variante *RNG* del modelo de Smagorinsky y el modelo *WALE* presentan una mayor penetración del *jet* en la velocidad axial y en la fracción de mezcla. El modelo de una ecuación para k^s , el Smagorinsky convencional y su variante Lilly, son los que mejor concuerdan con el decaimiento de la velocidad axial; sin embargo, el de k^s predice un mejor perfil en el caso de $\langle \xi \rangle$. La discrepancia en el caso de la velocidad probablemente sea debido al modelado estático de los términos submalla en las ecuaciones de transporte (no hay un ajuste espacial-temporal en los parámetros de los modelos), aunque este aspecto quedó fuera del análisis en esta tesis. En el caso de las componentes *rms*, se observa un patrón acorde: los modelos que no capturan las fluctuaciones en zonas más cercanas a la boquilla (hasta aproximadamente $5D_{jet}$) son los que presentan mayor penetración axial.

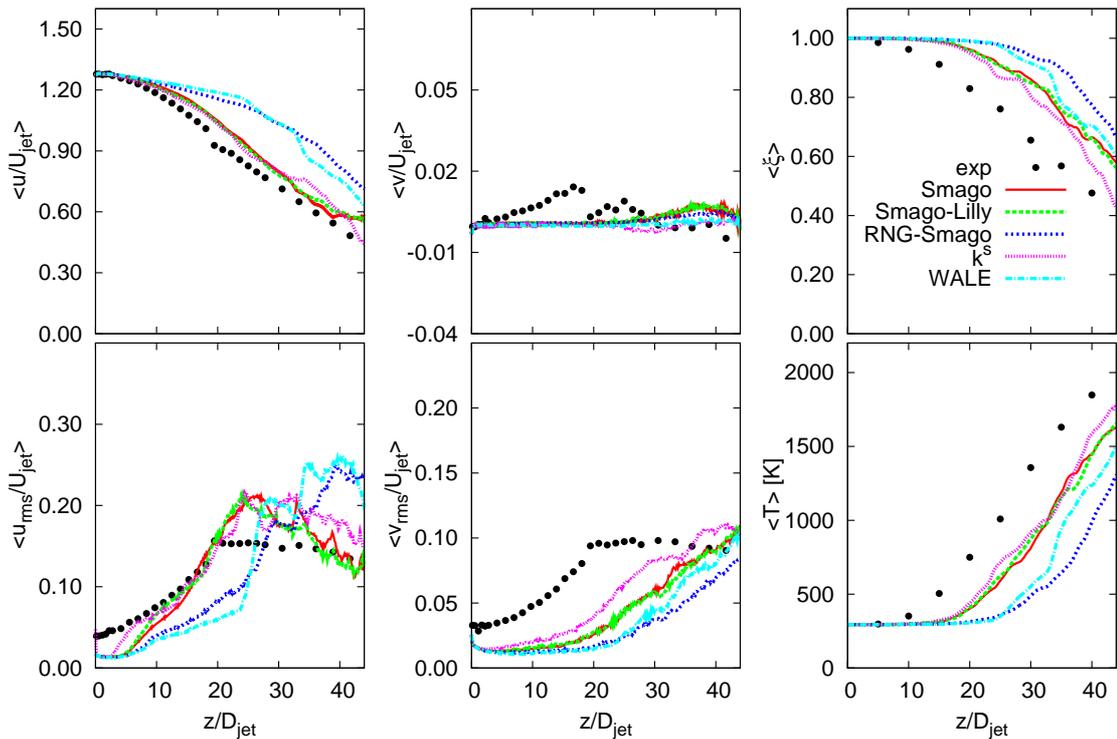


Fig. 6.6: **Llama D; LES y flamelets.** Perfiles de las componentes axial y radial de la velocidad (media y *rms*), fracción de mezcla y temperatura (media) en el eje central producidos por diferentes modelos submalla de *LES*.

En la Figura 6.7 se muestran los perfiles axiales de la energía cinética turbulenta total y submalla en el eje central de la llama determinada por los modelos evaluados. En todos los casos, el comportamiento de la energía cinética total del flujo es similar; la cantidad de energía capturada por la malla es, con ligeras diferencias, de intensidad cercana en todos los casos. Sin embargo, en el caso de la componente submalla, las variantes del modelo de Smagorinsky no reproducen la evolución de la energía cinética capturada por la malla. El modelo de una ecuación para k^s es el

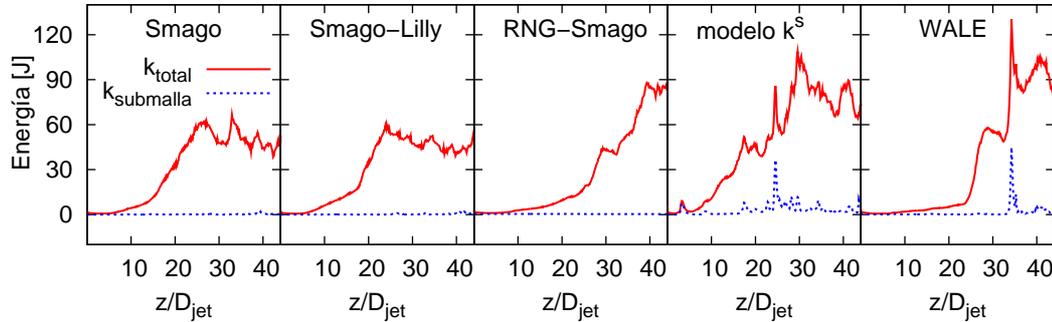


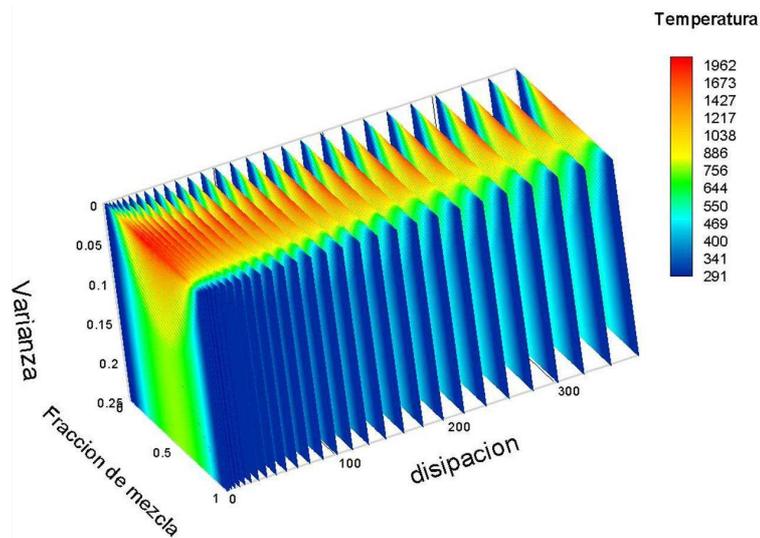
Fig. 6.7: **Llama D; LES y flamelets.** Perfiles axiales de la energía cinética turbulenta, total y submalla, en el eje central de la llama para los modelos submalla evaluados.

que muestra una mejor dinámica de la turbulencia submalla del flujo. Este resultado es consistente con la teoría, ya que los demás modelos suponen inherentemente una hipótesis de equilibrio en la que los términos de transporte en la ecuación para k^s son eliminados y la producción local de energía cinética submalla queda en balance exacto con su disipación. Para las simulaciones principales de esta tesis se ha empleado el modelo de una ecuación para k^s en conjunto con la hipótesis de la difusión por gradiente para los escalares resueltos en *LES*. En la Tabla 6.2 se muestra un resumen de las ecuaciones resueltas para las configuraciones estudiadas junto al tipo de integración numérica y cierre de la turbulencia.

El modelo de flamelets empleado se ha descrito en capítulos anteriores (4 y 5). Los cálculos en este modelo discretizan y tabulan la química en el espacio $[\xi; \xi_v^2; \chi^*]$. La Figura 6.8 muestra este espacio para la temperatura. La reacciones de combustión en este modelo son reproducidas por el mecanismo químico reducido de Smooke de 16 especies y 35 reacciones (ver Apéndice E). La varianza y la tasa de disipación para la interpolación de la *LUT* se han obtenido mediante un modelo de equilibrio local de manera similar que en [22]. Sin embargo, para propósitos de comparación, también se ha resuelto una ecuación para la varianza [102] y otra para el segundo momento de la fracción de mezcla [210]. Ambos procesos han sido detallados en el Apartado 4.6.3.

Tabla 6.2: llamas C, D y E. Ecuaciones resueltas mediante *LES*

Ecuación	Turbulencia	Integración
Continuidad	-	-
Cantidad de movimiento	1 ecuación para k^s	Adam-Moulton 3er. orden <i>CDS</i>
Fracción de mezcla, $\tilde{\xi}$	Difusión por gradiente $Sc_t=0.4$	Adam-Moulton 3er. orden SMART
Energía cinética turbulenta submalla, k^s	Difusión por gradiente $Sc_t=1.0$	Adam-Moulton 3er. orden SMART
Ecuación para ξ_v^2 y $\tilde{\xi}^2$	Difusión por gradiente $Sc_t=0.4$	Adam-Moulton 3er. orden SMART

Fig. 6.8: Distribución de la temperatura en la *LUT* generada por el modelo de flamelets.

6.5. Condiciones de contorno para la turbulencia

Como se ha mencionado en el Apartado 5.5, la especificación de condiciones realistas para la turbulencia en *LES* es crucial para la correcta predicción de un flujo turbulento. Para el desarrollo de este trabajo, inicialmente se evaluaron tres métodos para generar las condiciones para la turbulencia en la boquilla:

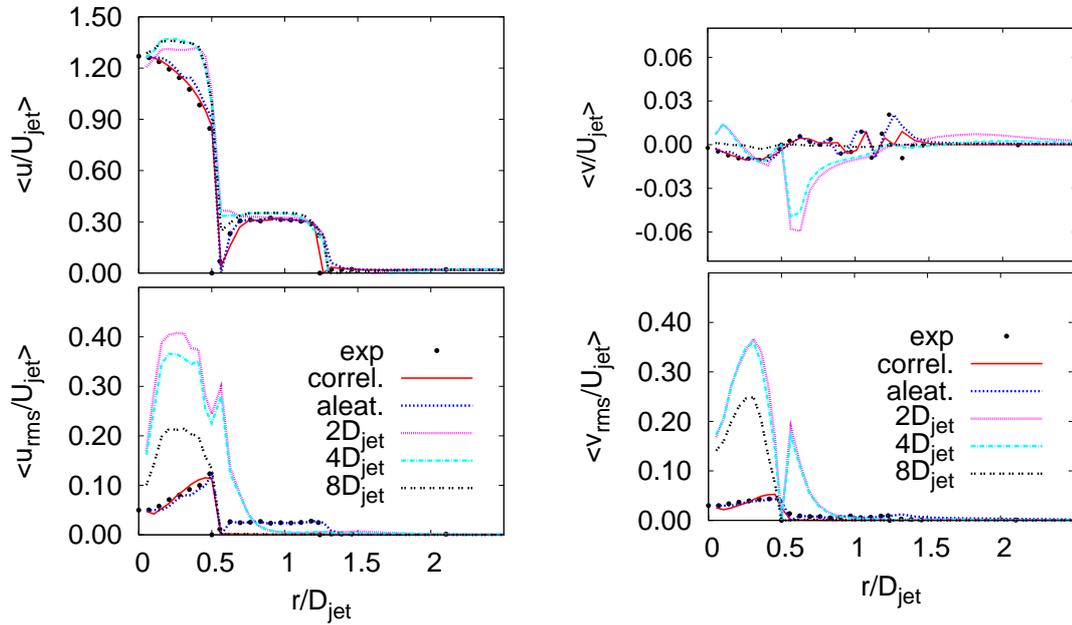


Fig. 6.9: **Llama D; LES (Ecuación k^s) y flamelets.** Condiciones de contorno generadas mediante tres procedimientos: (1) fluctuaciones correlacionadas, (2) fluctuaciones aleatorias y (3) con tres longitudes de desarrollo ($2D_{jet}$, $4D_{jet}$ y $8D_{jet}$) aguas arriba de la boquilla.

1. Extensión del dominio aguas arriba del quemador, de tal manera que las estructuras de la turbulencia se generen por la evolución o desarrollo propio del flujo. Tiene la desventaja de elevar sensiblemente el tiempo de cómputo.
2. La imposición de fluctuaciones aleatorias ϑ a un perfil medio de velocidad a la entrada, extraído de los datos experimentales. Las fluctuaciones se generan de manera que posean una media igual a cero y una desviación estándar de uno. Esta solución tiene un bajo coste computacional; sin embargo, no posee un comportamiento físico realista ya que las escalas de las estructuras turbulentas generadas no guardan una correlación espacial adecuada.
3. La generación de fluctuaciones turbulentas que satisfagan una escala de longitud integral dada y un tensor de esfuerzos de Reynolds, extraídos de los datos experimentales, cumpliendo una función de correlación de forma gaussiana, de acuerdo al procedimiento detallado en [110]. El perfil medio de velocidades proviene de la interpolación de los valores experimentales. La escala de longitud ha sido especificada con un modelo simple de longitud de mezcla como $L = C\Delta r$, donde r es la distancia a la pared más cercana y C es una constante igual a $2/3$ [109].

En todos los procedimientos, la entrada del dominio del cálculo ha sido desplazada aguas arriba de la boquilla del quemador. Para la primera opción, se han probado diversas longitudes de desarrollo, mientras que para los dos últimos procedimientos la entrada ha sido desplazada $0.1D_{jet}$. La resolución de la malla y las dimensiones del dominio son iguales, para todos los casos, a partir de la boquilla. La termoquímica es determinada por el modelo de flamelets.

En la Figura 6.9 se muestran los perfiles generados por estos procedimientos al final de la boquilla y se comparan con los valores reportados en los experimentos. Los perfiles turbulentos generados mediante fluctuaciones, métodos 2 y 3, guardan una buena correspondencia con la estructura del perfil experimental. Por el contrario, la extensión aguas arriba del dominio, incluso hasta $8D_{jet}$, no es capaz de generar condiciones adecuadas, produciendo fluctuaciones excesivas en la zona del *jet*, aunque el perfil medio fuera de esta zona está próximo a los valores experimentales.

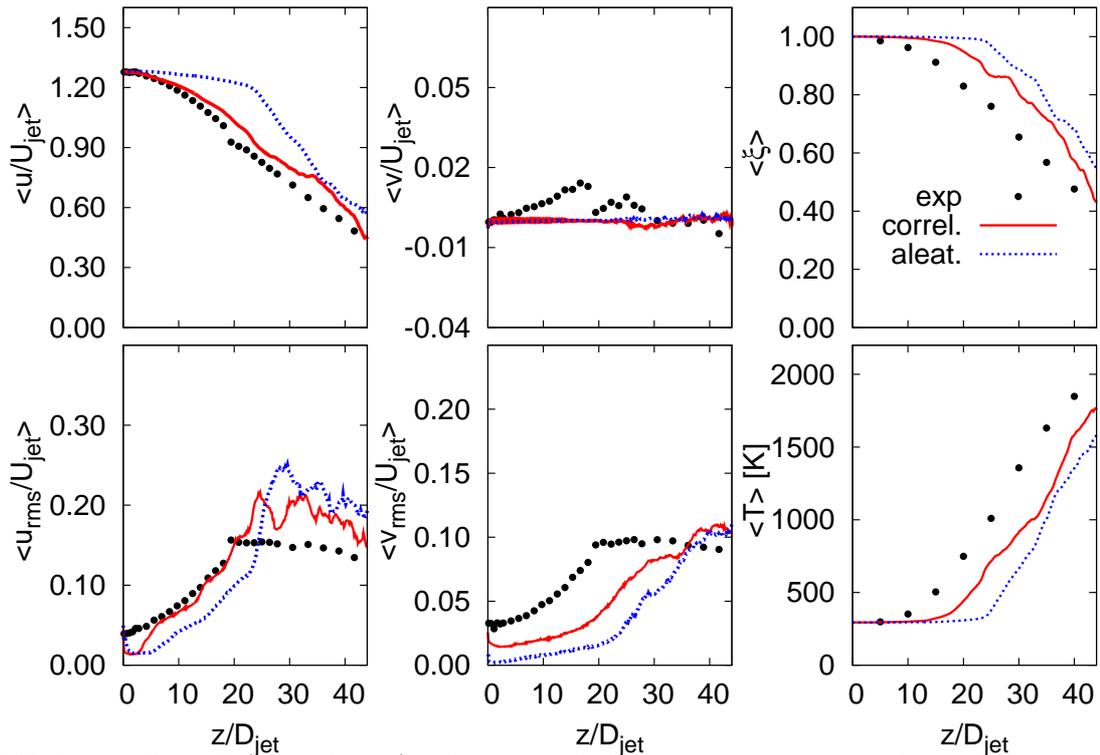


Fig. 6.10: Llama D; *LES* (Ecuación k^s) y flamelets. Perfiles de las componentes axial y radial de la velocidad (media y *rms*), fracción de mezcla y temperatura (media) en el eje central producidos por la imposición de condiciones de contorno por fluctuaciones aleatorias y correlacionadas espacialmente en la entrada del dominio.

En la Figura 6.10 se comparan los procedimientos de generación de condiciones turbulentas con fluctuaciones aleatorias y correlacionadas (métodos 2 y 3). Los perfiles correlacionados espacialmente muestran un decaimiento de la velocidad axial a lo largo del eje más próximo al experimental, mientras que el caso con fluctuaciones aleatorias predice una mayor penetración del *jet* que también se manifiesta en la fracción de mezcla. En el caso de la componente radial de la velocidad, ambos procedimientos predicen un valor medio nulo en todo el eje. La intensidad media de las fluctuaciones (valores *rms*) muestra niveles similares, aunque para los perfiles correlacionados se observa un nivel ligeramente más próximos a los experimentales. La temperatura, puesto que viene determinada por el modelo de flamelets, sigue el patrón determinado por la fracción de mezcla, con valores medios más cercanos a los experimentales cuando se emplean perfiles correlacionados. Por tanto, aunque estos últimos muestran aún discrepancias con los valores experimentales, predicen un comportamiento del flujo similar al reportado en otros trabajos (ver por ejemplo [162] y [196])

y han sido empleados en las simulaciones principales de esta tesis.

En la Figura 6.11 se muestran los perfiles de velocidad media y *rms*, al final de la boquilla, que se han generado con este método para las tres configuraciones analizadas y se comparan con los valores en los experimentos para este mismo segmento radial. Conviene notar que los perfiles están adimensionalizados y que, como se ha mencionado anteriormente, las velocidades y gastos máscicos de las corrientes de combustible y piloto van escalando proporcionalmente entre las llamas C a E. En el caso de la llama C, los experimentos no reportan datos para el campo de velocidad (ver [232]) por lo que en las figuras se comparan con los valores de la llama D escalados proporcionalmente. En cualquier caso, los perfiles medios adimensionalizados para las tres llamas son muy similares.

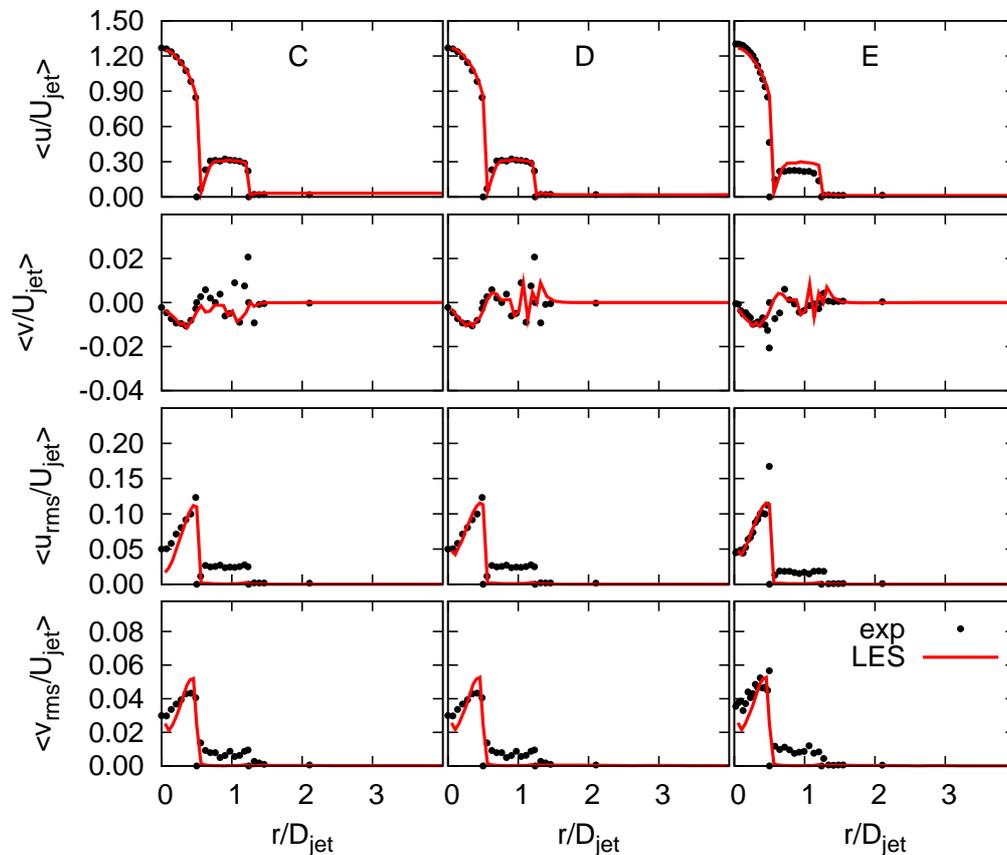


Fig. 6.11: Llamas C, D y E; *LES* (Ecuación k^s) y flamelets. Comparación de las condiciones de contorno generadas artificialmente con los perfiles experimentales.

6.6. Dominio de *S-LEM*

En *S-LEM*, cada celda en *LES* esta asociada con un dominio submalla unidimensional para el modelado de los procesos. Como se ha señalado en el Apartado 5.7.3, este dominio submalla debe resolver la escala espacial más pequeña del flujo. Dada la dificultad que entraña desarrollar un algoritmo que discretize en un número de elementos variable (por ejemplo, de celda a celda),

se ha optado por dividir todos los subdominios *LEM* de forma uniforme con 108 elementos⁷. Esta práctica es común en todos los trabajos publicados hasta ahora con este modelo.

En la Figura 6.12 se muestran contornos típicos del ratio entre el tamaño de la escala de filtrado en *LES* (Δ) y la escala de Kolmogorov (η) determinada en *S-LEM*, de acuerdo a la Expresión (5.21), para las tres llamas. El valor de este ratio es un indicador de las necesidades de resolución del subdominio unidimensional en determinados momentos de la simulación. En la figura se observa que, como cabría esperar, en zonas de alta turbulencia, estas necesidades son mayores, siendo la llama E el caso extremo por tener un número de Reynolds más elevado. Este ratio tiene relevancia en la simulación de los torbellinos submalla mediante los procesos de *triplet maps*. El rango para el tamaño aleatorio del modelado de torbellinos (ver Apartados 4.7 y 5.7) esta acotado entre Δ y η . Por tanto, con el número de elementos empleados, las necesidades impuestas por este algoritmo estarían mayoritariamente cubiertas. En el caso más extremo, aun cuando el espaciado no fuera suficiente para modelar un torbellino que aleatoriamente tuviera el tamaño η (requeriría un mínimo de seis elementos de acuerdo a (5.21)) el impacto se reflejaría en una reducción del rango efectivo de escalas en los torbellinos modelados ($\Delta-\eta$) pero la difusividad turbulenta inducida por el modelado de los torbellinos submalla no cambiaría [226]. De hecho, para no elevar excesivamente las necesidades de discretización del subdominio, se ha determinado en estudios [239, 64] que el tamaño mínimo de un torbellino podría ser hasta del orden de 10η (ver Ecuación (5.22)).

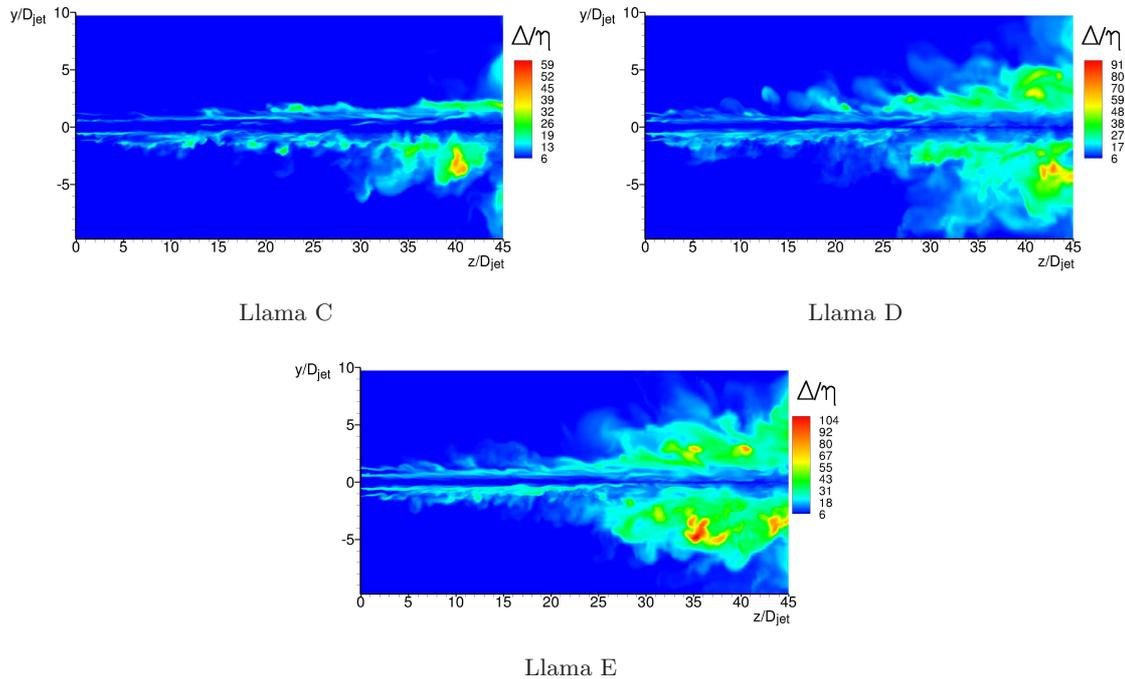


Fig. 6.12: **Llamas C, D y E; *LES* (Ecuación k^s), flamelets y *S-LEM* no reactivo.** Ratio de escalas típico entre el tamaño de filtro en *LES*, Δ , y la escala de Kolmogorov, η . Los dominios submalla unidimensionales de *S-LEM* están discretizado en 108 elementos en las tres llamas.

⁷Por conveniencia para el algoritmo de *triplet maps* es recomendable que el valor sea múltiplo de 6, número mínimo de elementos necesarios para modelar un torbellino. En el Apéndice B se analizan mediante casos sencillos otras resoluciones en el subdominio de *S-LEM*.

6.7. Transporte de grandes escalas en *S-LEM*

La convección de grandes escalas de los escalares resueltos en *S-LEM* se ha modelado mediante el transporte entre celdas contiguas de segmentos del dominio submalla. El método, denominado *splicing*, se ha descrito en los Apartados 4.7.2 y 5.7. A grandes rasgos, el proceso consiste en el intercambio de porciones de subdominios de acuerdo a los gastos máxicos que atraviesan las caras de las celdas de la malla de *LES*. Al tratarse de intercambios entre celdas contiguas, la frecuencia de eventos de este proceso está restringida a $CFL \leq 1$. Por otro lado, las ecuaciones de *LES* son resueltas mediante una formulación implícita. En esta tesis se ha conseguido un acoplamiento eficiente entre ambos procesos manteniendo los requisitos de una discretización explícita solo en la dirección axial (Ecuación 6.1) y determinando la frecuencia de eventos de *splicing* en función del ratio de escalas temporales de los dos procesos. Por tanto, el *splicing*, como el resto de procesos de *S-LEM*, evoluciona de acuerdo a su propia escala de tiempo hasta igualar el Δt_{LES} .

Una de las principales características del algoritmo de *splicing* de esta tesis es la incorporación de términos de alto orden para el transporte haciendo una analogía con la técnica de la corrección diferida [277], habitualmente usada en volúmenes finitos, incorporando los flujos correctivos de alto orden a toda la distribución submalla. Los detalles pueden consultarse en el Apéndice B donde, mediante configuraciones simples, se ha comprobado el primer orden en el transporte modelado con el proceso de *splicing* y se ha analizado el comportamiento del algoritmo modificado. En la Figura 6.13 se muestran los perfiles de la fracción de mezcla media $\langle \xi \rangle$ en tres estaciones axiales de la llama D determinados mediante volúmenes finitos, (con SMART) y *S-LEM* para dos situaciones: el algoritmo en su versión original e incorporando la corrección (Superbee) por alto orden. La corrección mejora notablemente los resultados, sobre todo aguas abajo de la boquilla, donde la turbulencia es más intensa.

6.8. Proceso de solución

Las condiciones iniciales del flujo para las simulaciones se han impuesto extendiendo los perfiles experimentales en la entrada a todo el dominio. Esta estrategia ha mostrado ser numéricamente más estable que comenzar la simulación desde el reposo o con las condiciones del coflujo de aire. Puesto que las ecuaciones se resuelven bajo una formulación implícita, en las primeras etapas el flujo evoluciona con pasos temporales del orden de 10^{-4} s con el modelo de flamelets activado. El campo de densidad es moderadamente relajado durante los transitorios iniciales. Una vez establecido un patrón de flujo desarrollado, el paso temporal se ajusta de acuerdo a:

$$\Delta t_{LES} = 0,5 \frac{L_{axial}}{(U_{max})(Nx_{axial})}, \quad (6.1)$$

siendo L_{axial} la longitud axial del dominio, U_{max} el valor máximo de la velocidad axial de la llama y Nx_{axial} el número de celdas de discretización en dirección axial. De esta manera que se mantienen los requisitos de discretización explícita en dirección axial, mientras que se evita la dependencia con el CFL en las direcciones radial y acimutal que de otra manera podrían reducir drásticamente el tamaño de paso temporal usado [210]. El valor de Δt_{LES} es del orden de 10^{-5} s para las tres llamas.

Las ecuaciones de transporte tienen una formulación adecuada para flujos con bajo número de

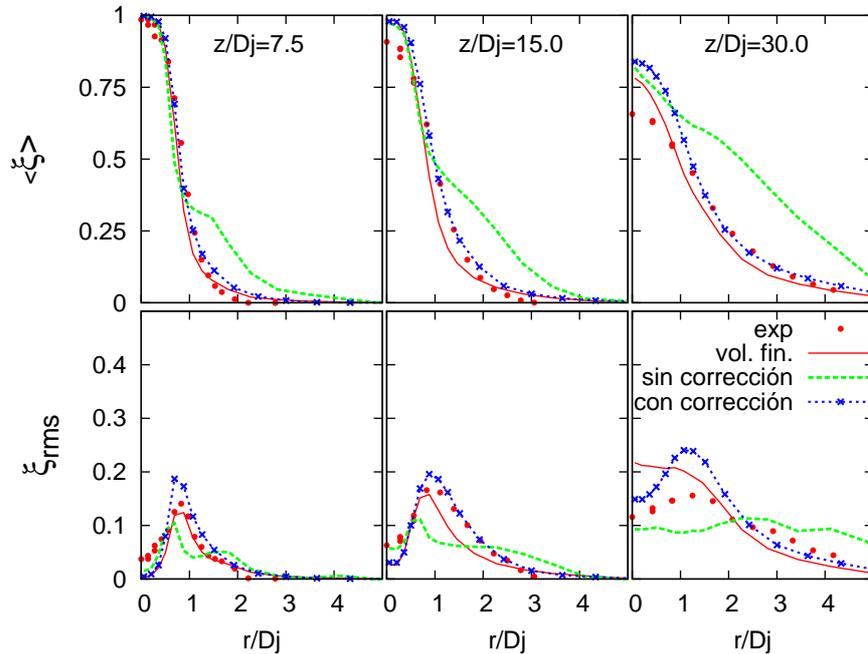


Fig. 6.13: Llama D; *LES* (Ecuación k^s), flamelets y *S-LEM* no reactivo. Perfiles radiales de la fracción de mezcla media y *rms* en tres estaciones axiales determinadas por volúmenes finitos y *S-LEM* (sin corrección de alto orden e incorporando ésta al algoritmo de *splicing*).

Mach donde la densidad es variable y función exclusiva de la temperatura. La densidad viene, por tanto, determinada exteriormente por el modelado de la combustión, ya sea por medio de flamelets o *S-LEM*. En cada paso temporal, el campo actualizado de la densidad es usado por *LES* para evolucionar las ecuaciones de cantidad de movimiento y transporte de escalares.

La solución del flujo es monitorizada, principalmente en las estaciones axiales donde existen datos experimentales; una vez que la estadística se mantiene estable, se considera alcanzada la solución “estacionaria”⁸. Llegado a este punto, se activa el modelo *S-LEM*, en la modalidad reactiva o inerte dependiendo del caso, inicializando el campo submalla de escalares con distribuciones uniformes a partir de los campos obtenidos con la solución de flamelets.

Tal y como se muestra en la Figura 6.14, la convección entre celdas de los campos submalla en *S-LEM*, algoritmo de *splicing*, altera desde el primer paso temporal esta distribución inicial creando variaciones en el campo que posteriormente son suavizadas por los procesos submalla de mezclado y difusión.

6.9. Tiempo de cómputo

El proceso de solución para las ecuaciones de transporte de *LES* y los procesos involucrados en *S-LEM* es paralelizado con subrutinas MPI dividiendo el dominio en dirección axial y resolviendo en 20 procesadores⁹. En la Tabla 6.3 se muestran los tiempos de cómputo para cada tipo de simulación.

⁸En todos los casos, la estadística es obtenida promediando 6 veces el tiempo de residencia total del flujo, definido como el tiempo que tardaría una partícula en recorrer axialmente el dominio a la velocidad de la corriente del combustible o *jet*.

⁹Intel Dual-Core Xeon Duales L5240, 3.0GHz con 8 Gb de RAM.

En la última columna se indica el aumento relativo de tiempo con respecto a la simulación del flujo con el modelo de flamelets. La incorporación del modelo *S-LEM* para resolver un único escalar (fracción de mezcla) no reactivo eleva el tiempo total de cómputo 2.33 veces; incorporar el proceso de combustión, en este caso mediante un mecanismo de un sólo paso (solución para dos especies químicas y temperatura) incrementa el tiempo hasta 3.18 veces. Por tanto, la mayor cantidad de tiempo de cómputo en los procesadores es dedicada a resolver los procesos de *S-LEM*. Esto es debido a la cantidad total de elementos de los dominios submalla: aproximadamente 65 millones de elementos para todo el flujo. Comparando los tiempos de cálculo entre las dos modalidades de *S-LEM*, se puede estimar que la incorporación de la combustión al modelo, con el mecanismo empleado, eleva el tiempo de cómputo en 0.85 veces con respecto a la modalidad no reactiva. Sin duda, el avance tecnológico en los equipos informáticos y la optimización y paralelización de los cálculos ha permitido este tipo de simulaciones en tiempos razonablemente moderados (ver por ejemplo [181, 65, 64]).

Tabla 6.3: Tiempo de cómputo para las simulaciones principales

Modelado	Tiempo total	Por paso temporal	Relativo
<i>LES</i> + flamelets	33 hr 23 min	1 min 3 s	1.00
<i>S-LEM</i> no reactivo	75 hr 26 min	2 min 26 s	2.33
<i>S-LEM</i> reactivo	103 hr 5 min	3 min 20 s	3.18

6.10. Conclusiones

En este capítulo se han descrito las configuraciones experimentales que se han modelado en esta tesis junto con algunos aspectos que se han evaluado previamente a los cálculos numéricos principales. Los casos analizados, llamas C, D y E, están clasificados como llamas turbulentas pilotadas de difusión. El combustible es una mezcla de metano y aire. La geometría del quemador es la misma para las tres configuraciones; sin embargo, la velocidad de las corrientes piloto y *jet* es diferente en ellas y por tanto exhiben diferente número de Reynolds y probabilidad de extinción local. En el capítulo se han mostrado algunos análisis de sensibilidad de la predicción del flujo a factores tales como la resolución del dominio y la malla, el modelado submalla en las ecuaciones de *LES*, las condiciones de contorno en la entrada del dominio y la discretización y captura de escalas del modelo *S-LEM*, entre otros aspectos¹⁰. La comparación en tiempos de cómputo de las distintas simulaciones permite corroborar el alto coste computacional de *S-LEM*; sin embargo, la paralelización de los cálculos permite mantener éste en niveles moderadamente razonables.

Los resultados principales para las tres llamas se han dejado para los siguientes capítulos, que se han organizado según la técnica empleada en el modelado y el tipo de análisis.

¹⁰Los apéndices de este documento pretender complementar la visión general de estos análisis.

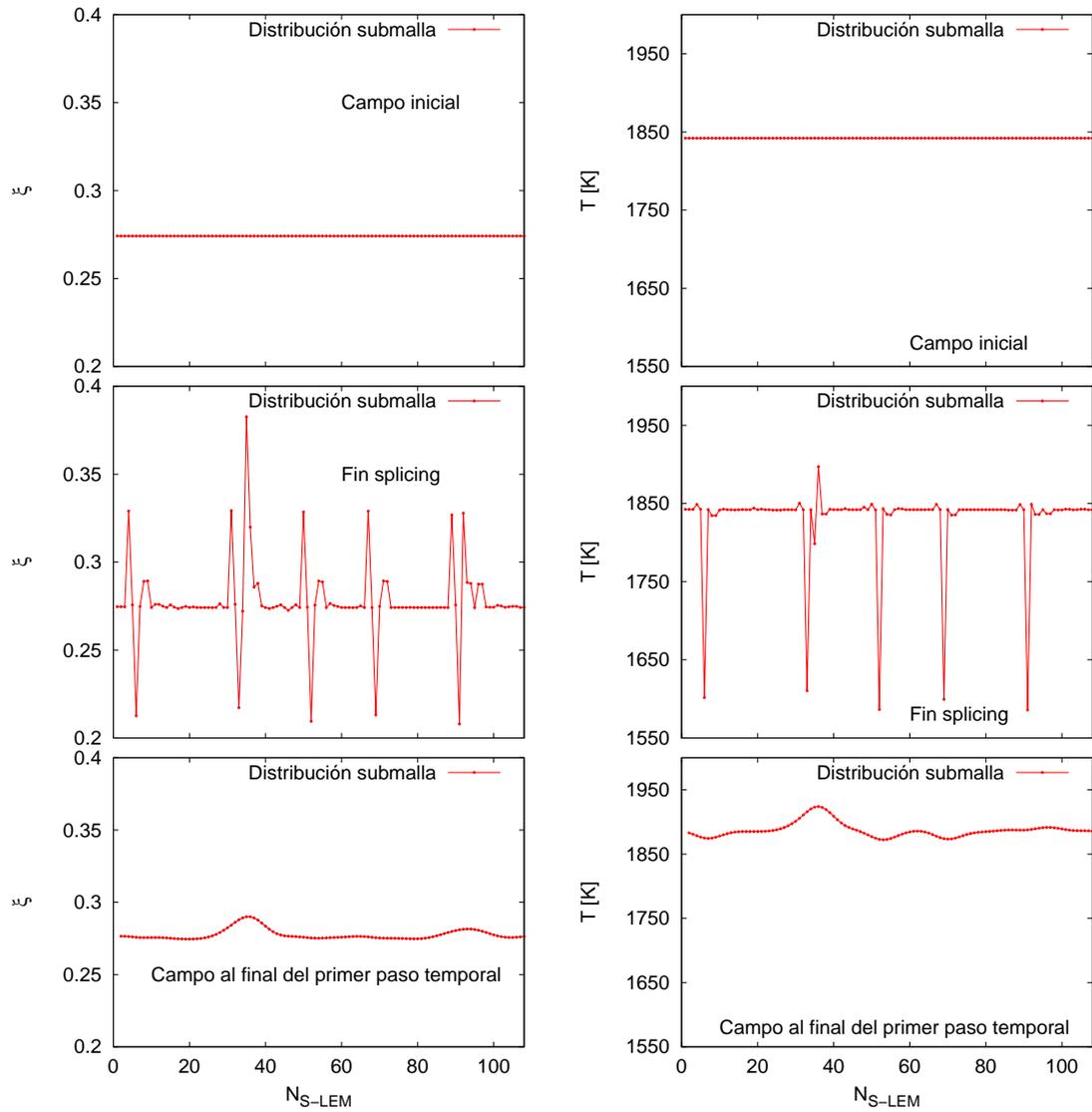


Fig. 6.14: Campo de escalares submalla de $S-LEM$. Los escalares son inicializados a partir de una distribución uniforme extraída de la solución del flujo con el modelo de flamelets. El modelo altera esta distribución desde el primer paso temporal.

Capítulo 7

Simulación con flamelets y *S-LEM* no reactivo

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones hechas para las llamas C, D y E, empleando el modelo de flamelets como modelo de combustión. Asimismo, mediante *S-LEM* se ha modelado el transporte de la fracción de mezcla con el propósito de evaluar su evolución con la de su contraparte equivalente en las ecuaciones de *LES*. De los cálculos numéricos se han obtenido los campos filtrados de las componentes de la velocidad y de los demás escalares transportados, así como las fracciones másicas de las principales especies químicas. Los valores promediados temporal y acimutalmente, así como la intensidad media de sus fluctuaciones (*rms*), se han comparado con los valores experimentales en distintas posiciones del flujo. Finalmente, se ha evaluado la predicción de especies químicas en función de la fracción de mezcla en los segmentos radiales que coinciden con las estaciones de medición en los experimentos.

7.1. Esquema de las simulaciones

En la Figura 7.1 se muestra un esquema de las simulaciones acoplando los modelos de flamelets y *S-LEM* no reactivo. En ella se resumen las interacciones y variables involucradas en cada modelo. El propósito es dar mayor claridad en la lectura e interpretación de los resultados presentados en este capítulo. *S-LEM* puede considerarse en estos cálculos como un módulo independiente (*LES-LEM-NR*) que sólo extrae información de *LES* durante el proceso de solución. Su principal finalidad es validar los procesos de transporte y mezcla submalla para la fracción de mezcla, comparando su evolución, la varianza y tasa de disipación, con las variables homólogas en la simulación con *LES* y flamelets (*LES-FMLT*).

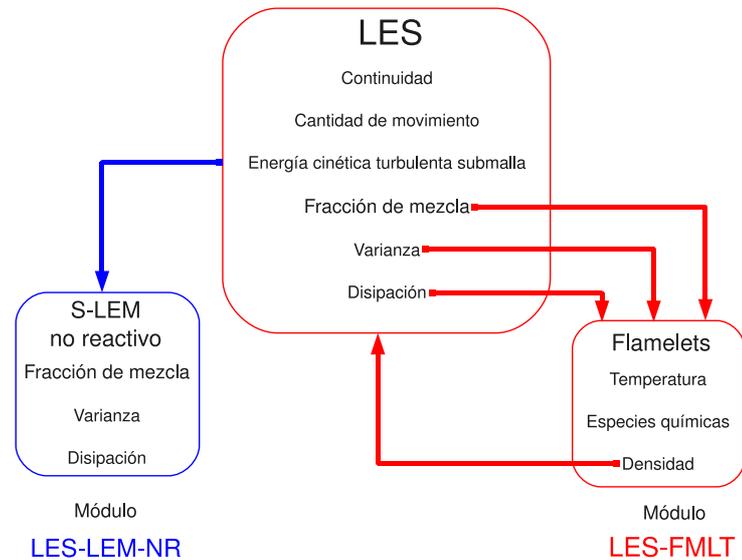


Fig. 7.1: *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Esquema de las simulaciones.

7.2. Campo instantáneo

En las Figuras 7.2 y 7.3 se muestran las distribuciones instantáneas de la velocidad axial, temperatura y fracción de mezcla para las tres llamas. En el caso de la Figura 7.3 se muestran los campos que provienen tanto de la ecuación en *LES* (Módulo LES-FMLT) como de *S-LEM* (Módulo LES-LEM-NR). Los contornos proporcionan una imagen de los complejos fenómenos que ocurren en el flujo turbulento. En general, en las tres configuraciones, el chorro central mantiene cierta estabilidad en las primeras etapas para posteriormente manifestar una repentina transición en los valores de los campos, donde el flujo presenta un régimen altamente turbulento. La longitud de penetración que exhibe el *jet* es menor en el caso de la llama D ($\approx 25D_{jet}$), mientras que la C muestra una transición menos violenta, dado el número de Reynolds de esta configuración. En la llama E, las altas velocidades podrían ser la causa de que el campo de temperaturas indique zonas con mayor presencia de fenómenos locales de extinción, sobre todo en zonas cercanas a la boquilla, en las capas de mezclado de corrientes. También podrían explicar la mayor penetración que muestra el chorro en esta configuración.

El campo de la fracción de mezcla determinado por *S-LEM* (Figura 7.3) captura en general las inestabilidades del flujo, guardando similitudes con el campo en *LES*, aunque en algunas zonas con valores más altos en el escaler.

7.3. Resultados estadísticos del flujo

7.3.1. Velocidades

En la Figura 7.4 se muestran los perfiles de la velocidad media y *rms* de las componentes axial y radial en el eje central del dominio para las tres configuraciones y se comparan con los valores experimentales. Se puede observar que el decaimiento en la velocidad axial media se predice adecuadamente en los tres casos; las fluctuaciones medias para esta componente muestran niveles

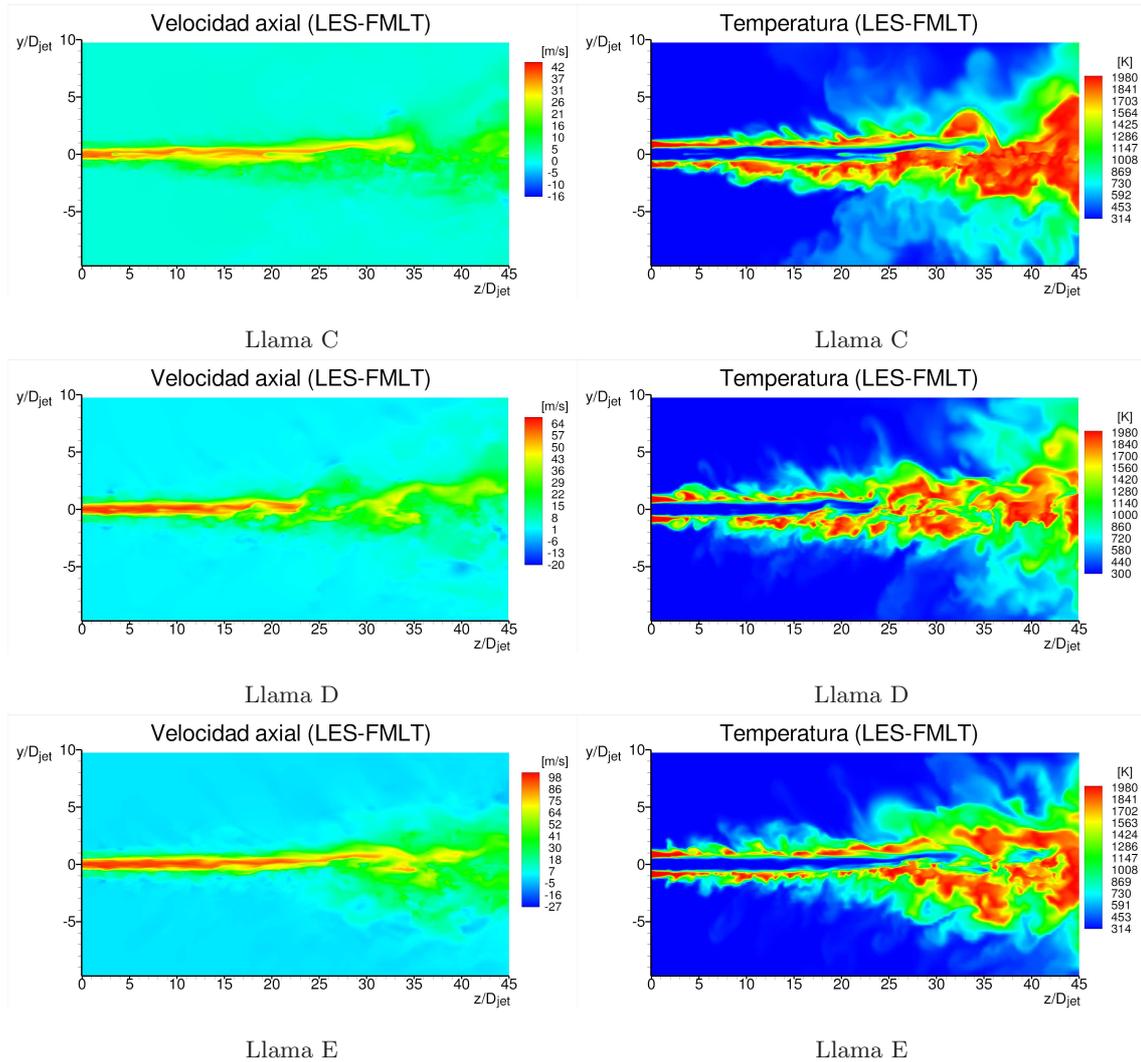


Fig. 7.2: **Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo.** Distribución instantánea de la velocidad axial (izquierda) y temperatura (derecha) determinada mediante LES y flamelets.

en torno a los experimentales, sobre todo en la llama D. Conviene recordar que en el caso de la llama C, no existen valores experimentales disponibles para las velocidades y , con el propósito de ilustrar su comportamiento, se han comparado con los valores de la llama D proporcionalmente escalados. La velocidad radial se mantiene prácticamente en cero y cercana a la experimental mientras que las fluctuaciones para esta componente son ligeramente inferiores a las experimentales. Este mismo comportamiento en el flujo se ve reflejado en la Figuras 7.5 y 7.6 (llamas D y E) en las que la velocidad axial y sus fluctuaciones presentan mejor correspondencia con los datos experimentales que la componente radial. En general, los trabajos consultados no reportan resultados para esta componente (sólo en las memorias de los *workshops TNF* se habla de discrepancias entre las predicciones numéricas para esta componente de la velocidad).

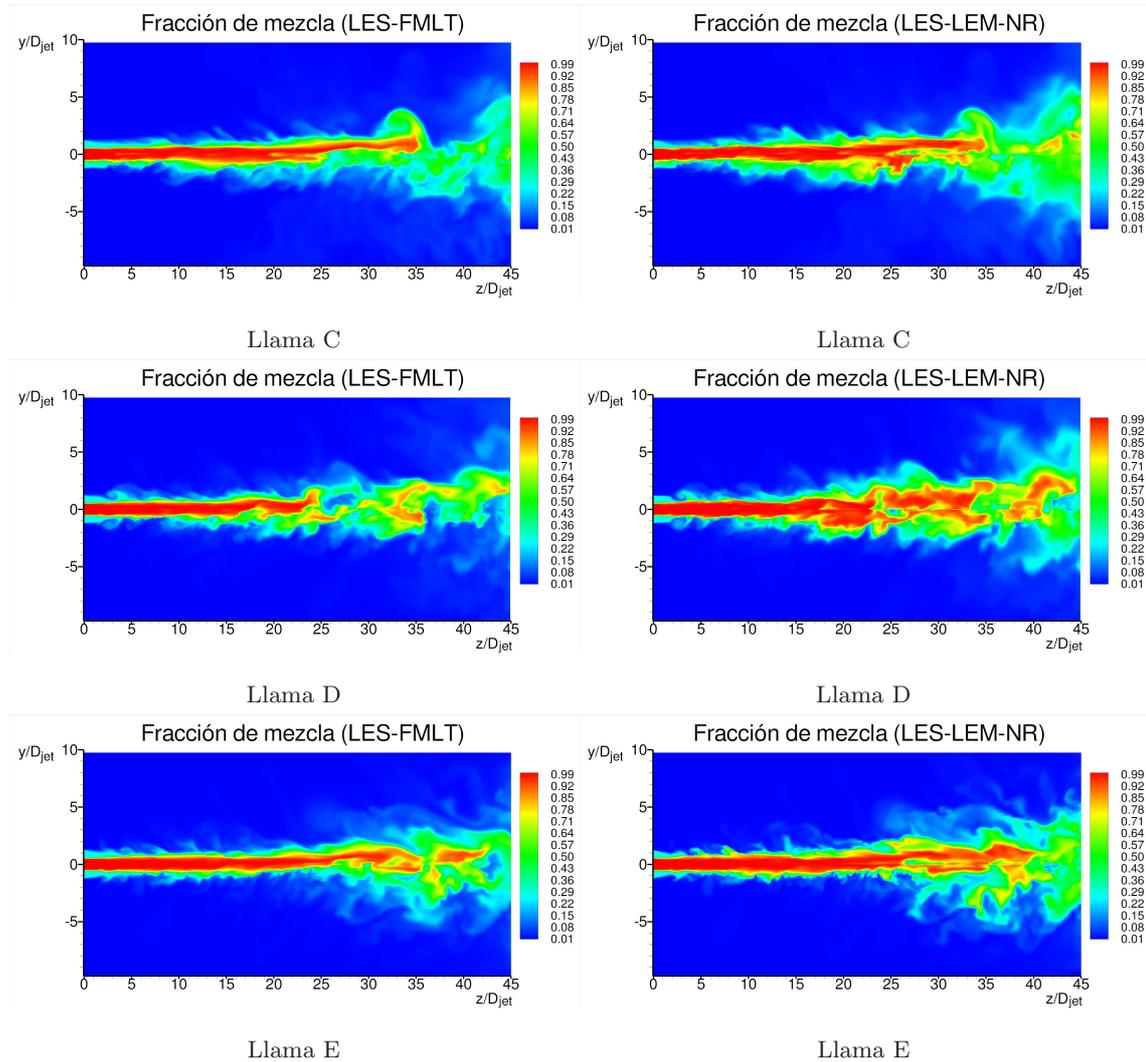


Fig. 7.3: Llamas C, D y E; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Distribución instantánea de la fracción de mezcla determinada mediante *LES* (izquierda) y *S-LEM* (derecha).

7.3.2. Escalares

En la Figura 7.7 se muestra el perfil de la fracción de mezcla y temperatura medias así como sus correspondientes valores *rms* en el eje central para las configuraciones C, D y E. En el caso de la fracción de mezcla, se presenta también el perfil determinado por el modelo *S-LEM* (módulo *LES-LEM-NR*). Hay una ligera sobrestimación de la temperatura conforme se avanza axialmente en las configuraciones D y E, mostrando un mejor acuerdo para la llama C. Para la fracción de mezcla, tanto la que proviene de la ecuación en *LES* como la de *S-LEM*, se muestran comportamientos similares, aunque con valores ligeramente superiores a los experimentales también para las llamas D y E, con un decaimiento axial menor que el experimental. La razón de las discrepancias en estas llamas podría estar en una incorrecta captura de los gradientes de la fracción de mezcla cerca de la

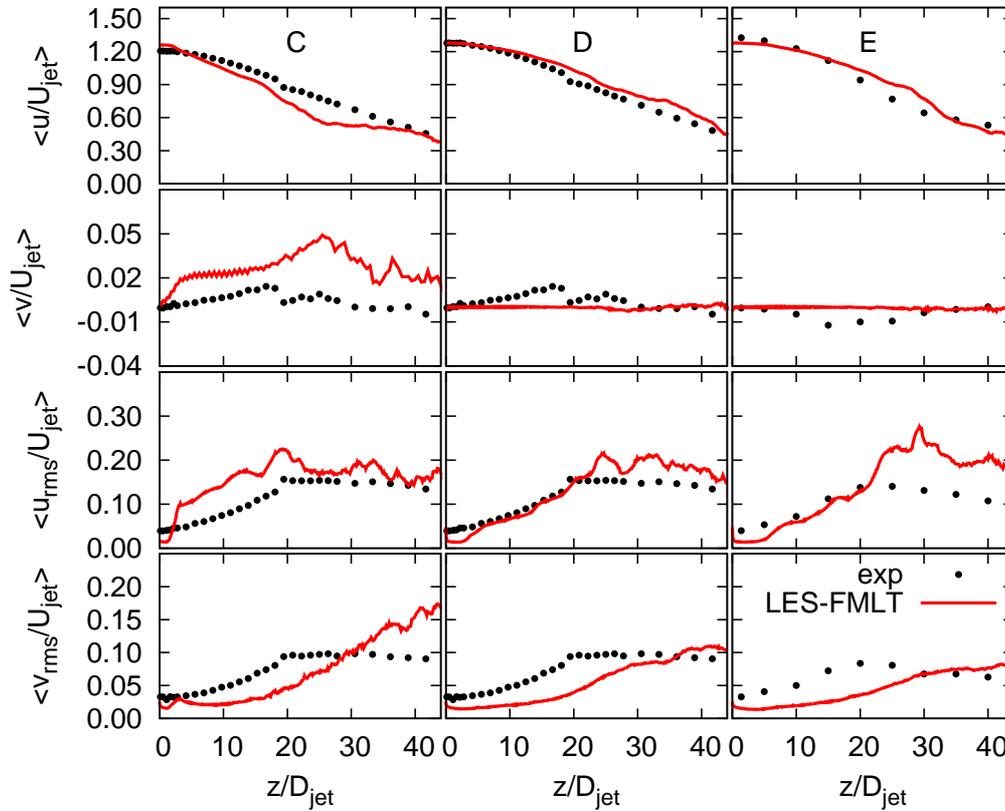


Fig. 7.4: Llamas C, D y E; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Perfiles de las velocidades axial y radial media y *rms* en el eje central.

boquilla, en las zonas de mezcla a altas velocidades entre las corrientes de combustible y piloto¹. El nivel en las fluctuaciones medias es adecuado aunque ligeramente inferior en la zona cercana a la boquilla y superior en las zonas centrales. El perfil de temperaturas, como cabría esperar en flamelets, muestra un comportamiento acorde con la distribución de ξ .

La discrepancias presentes en el eje axial para la fracción de mezcla no influyen significativamente en la predicción sobre el resto de zonas en el flujo, tal y como se muestra en la Figura 7.8; los perfiles radiales de ξ , tanto los determinados por la ecuación filtrada en *LES* como los de *S-LEM*, concuerdan adecuadamente con los valores experimentales en las estaciones axiales mostradas. Asimismo, tanto la temperatura media como su *rms* (Figura 7.9) concuerda razonablemente en todas las estaciones axiales para las tres llamas.

Los perfiles axiales de las fracciones máscas de las principales especies químicas se muestran en la Figura 7.10. En el caso de los reactantes CH_4 y O_2 se puede observar un ligero exceso de la fracción máscas de ambas especies aguas abajo del dominio para la llama D y E, mientras que ocurre lo contrario en la llama C. Para el resto de especies, las producidas por el proceso de combustión como el H_2 , H_2O , CO_2 y CO , hay ligeras deficiencias con respecto a las mediciones

¹Estas ligeras discrepancias también se observan en simulaciones de otros autores (ver por ejemplo [196, 166, 109, 162]).

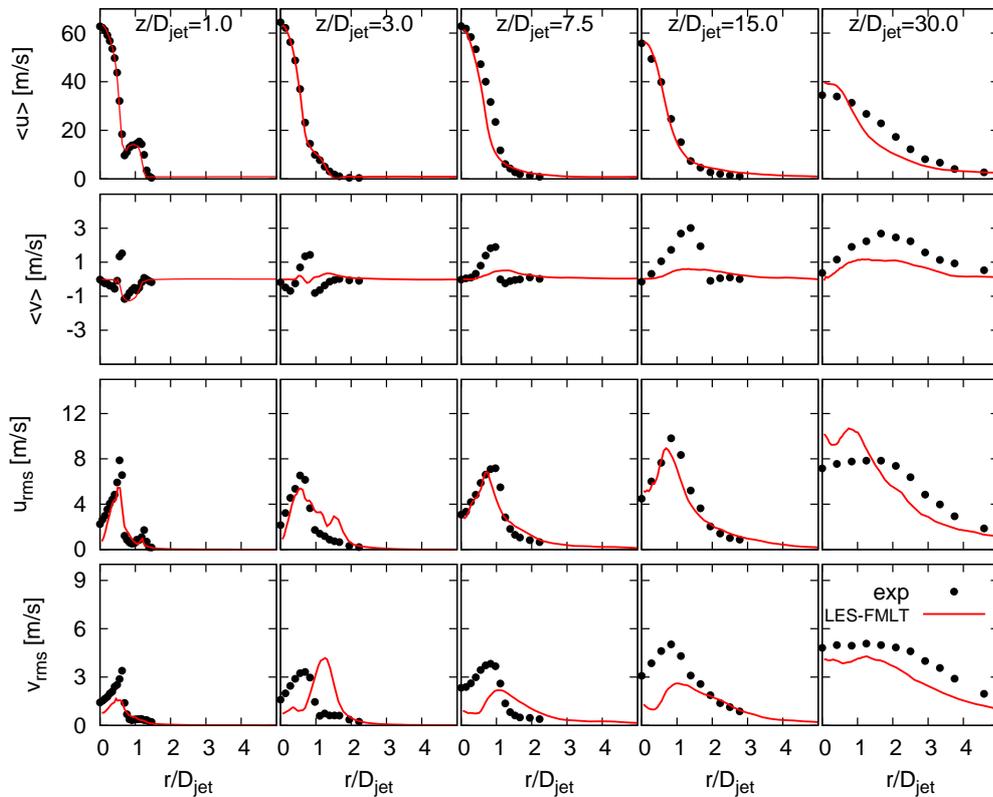


Fig. 7.5: **Llama D; LES, flamelets y S-LEM no reactivo.** Fluctuaciones medias y *rms* en las velocidades axial (u) y radial (v) en distintas estaciones axiales.

en la zona cercana a la boquilla en las configuraciones D y E y una ligera sobrestimación en la C. Lo anterior es congruente con el comportamiento observado en la fracción de mezcla en la Figura 7.7, ya que el estado termoquímico es función directa de ξ . En todo caso, de igual manera que para ξ , las predicciones presentan un aceptable ajuste con los datos experimentales en todo el dominio, como puede observarse en las Figuras 7.11 a 7.13 donde se presentan los perfiles radiales de los escalares en las cinco posiciones axiales. Las especies intermedias como el OH , H_2 y CO presentan discrepancias en algunas estaciones, principalmente aguas abajo del dominio; sin embargo, la tendencia es correctamente reproducida.

La comparación entre datos experimentales y numéricos también puede efectuarse en el espacio de la fracción de mezcla ξ . En las Figuras 7.14 a 7.16 se muestra la distribución de la temperatura y los escalares químicos promediados en el tiempo y se compara con los valores experimentales promediados de forma condicionada al valor de la fracción de mezcla. En la mayoría de los casos hay una concordancia adecuada, siendo las especies intermedias las que presentan mayores discrepancias con los perfiles experimentales.

En general, los resultados mostrados para las especies químicas son consistentes con las tendencias de la fracción de mezcla y temperatura determinada por el modelo de flamelets. Al igual que en otros trabajos similares, el modelado con flamelets ha mostrado ser una opción atractiva en

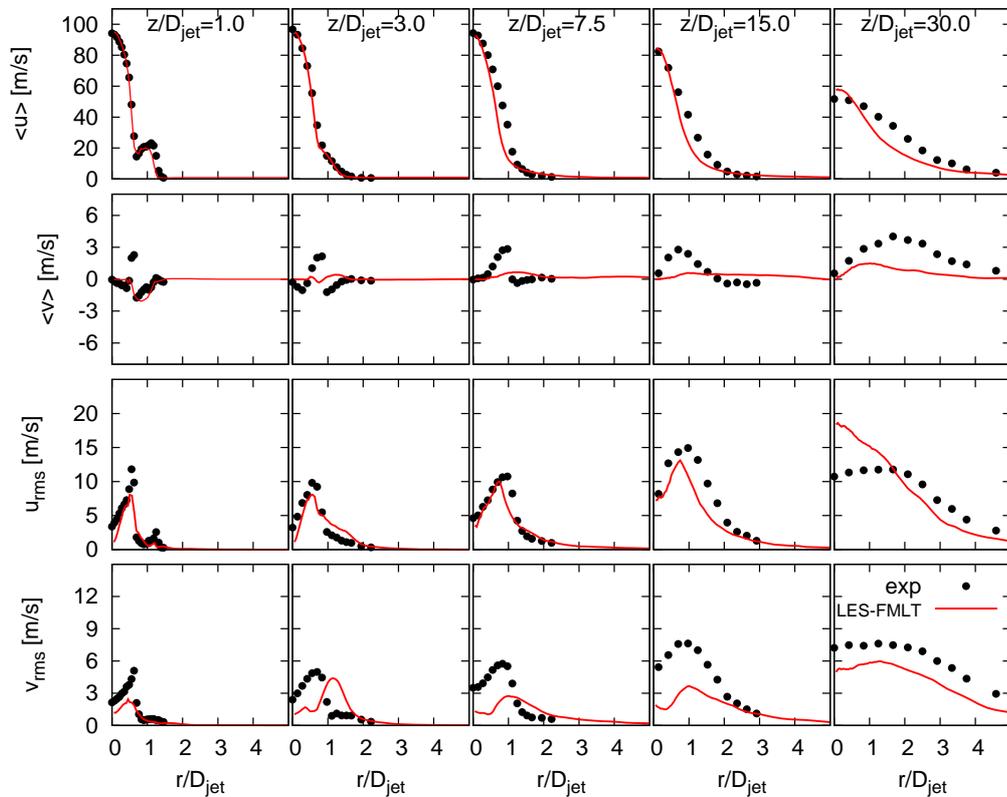


Fig. 7.6: **Llama E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo.** Fluctuaciones medias y *rms* en las velocidades axial (u) y radial (v) en distintas estaciones axiales.

las simulaciones *LES* de estas configuraciones, incluso en el caso de la llama E que presenta mayor probabilidad de extinción local.

7.4. Conclusiones

En este capítulo se han mostrado y discutido los resultados numéricos de las simulaciones acoplado a las ecuaciones de transporte en *LES* el modelo de flamelets. Para la fracción de mezcla, además de su ecuación en *LES*, se ha usado *S-LEM* para determinar su estructura tanto a nivel de las grandes escalas como submalla. Comparado con la evolución en *LES*, *S-LEM* ha mostrado ser capaz de capturar correctamente la evolución del escalar transportado y predecir adecuadamente los fenómenos de transporte asociados a su campo filtrado. En general, los resultados obtenidos en las tres configuraciones analizadas muestran un buen acuerdo con los datos experimentales. La estructura del flujo es reproducida razonablemente y las estadísticas demuestran una buena captura de los fenómenos complejos presentes en el flujo. El modelo de flamelets determina apropiadamente las especies químicas mayoritarias, por lo que puede considerarse una opción conveniente, considerando además su bajo coste computacional, en las simulaciones de las tres configuraciones analizadas.

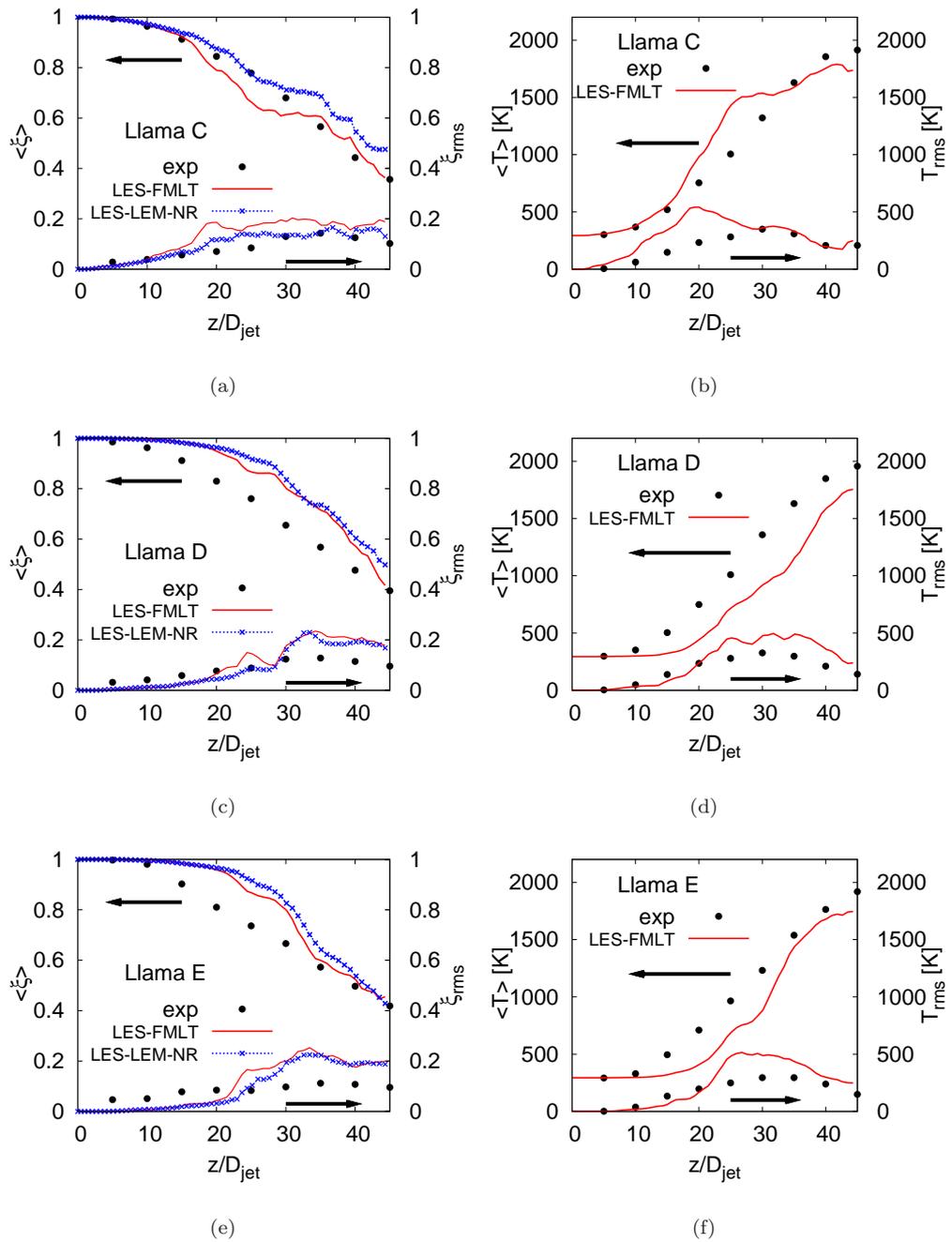


Fig. 7.7: Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles de la fracción de mezcla y temperatura medias y rms en el eje central.

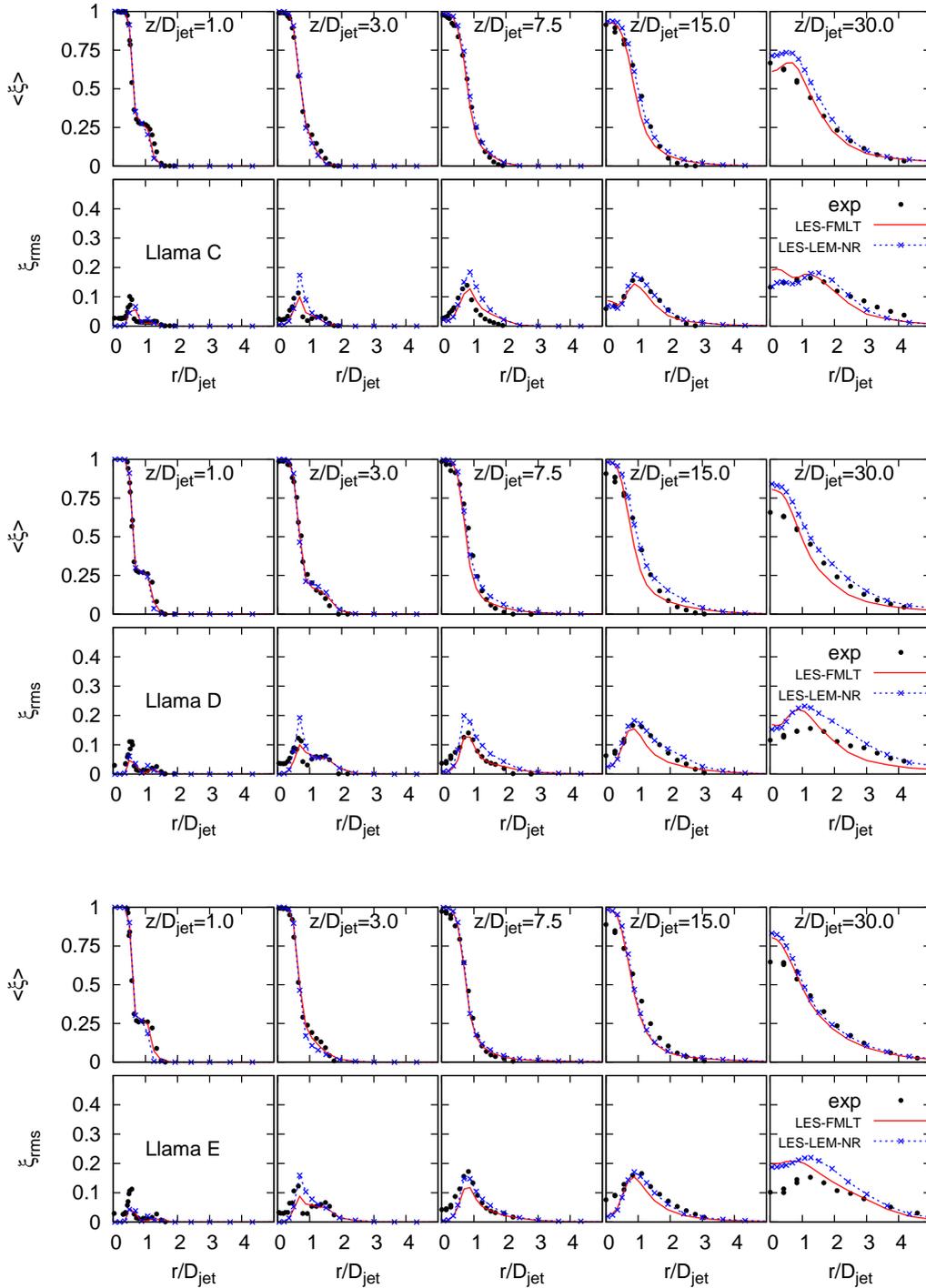


Fig. 7.8: Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles radiales de la fracción de mezcla media y rms en distintas estaciones axiales determinadas por LES y S-LEM.

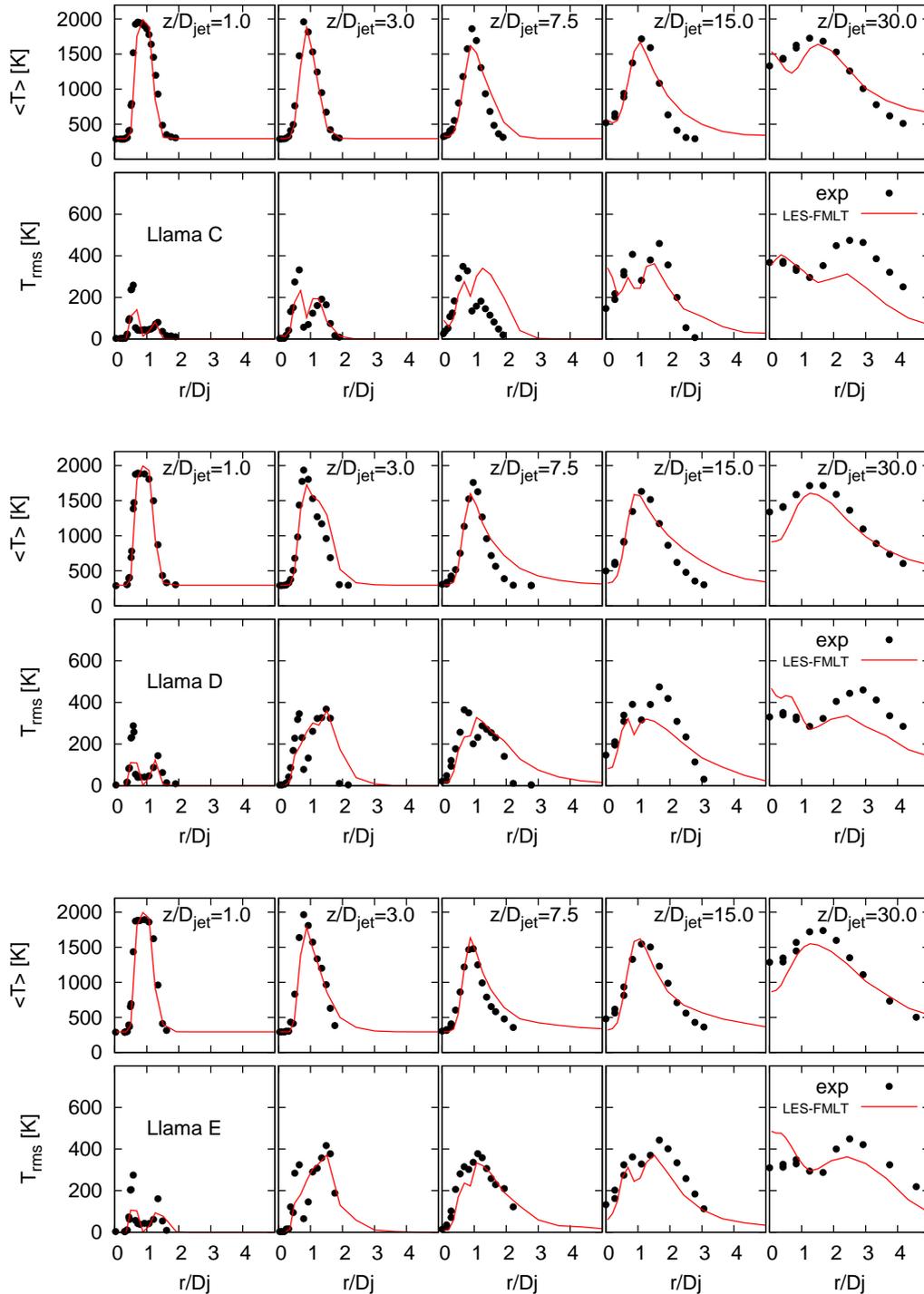


Fig. 7.9: Llamas C, D y E; LES, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Perfiles radiales de la temperatura media y rms en distintas estaciones axiales determinadas por LES y *S-LEM*.

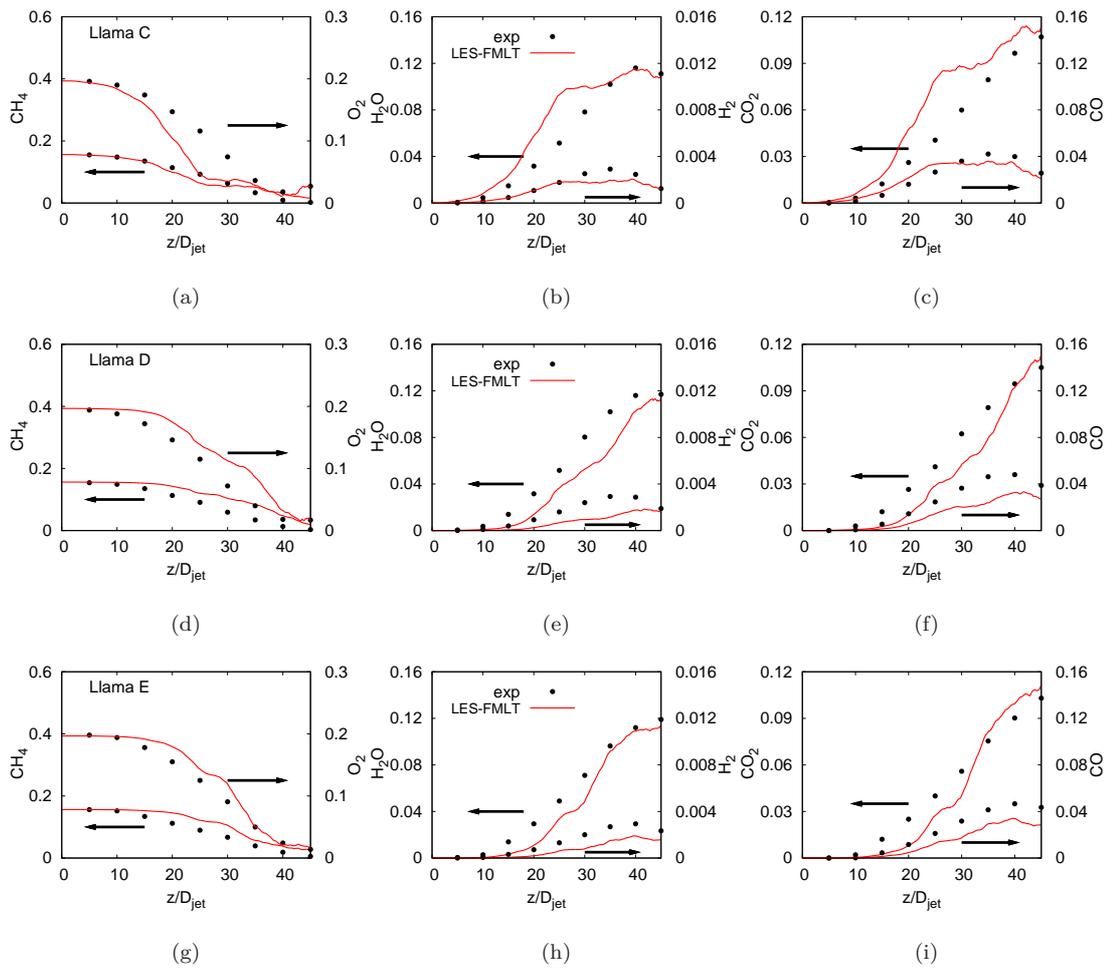


Fig. 7.10: Llamas C, D y E; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Distribución de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO en el eje central.

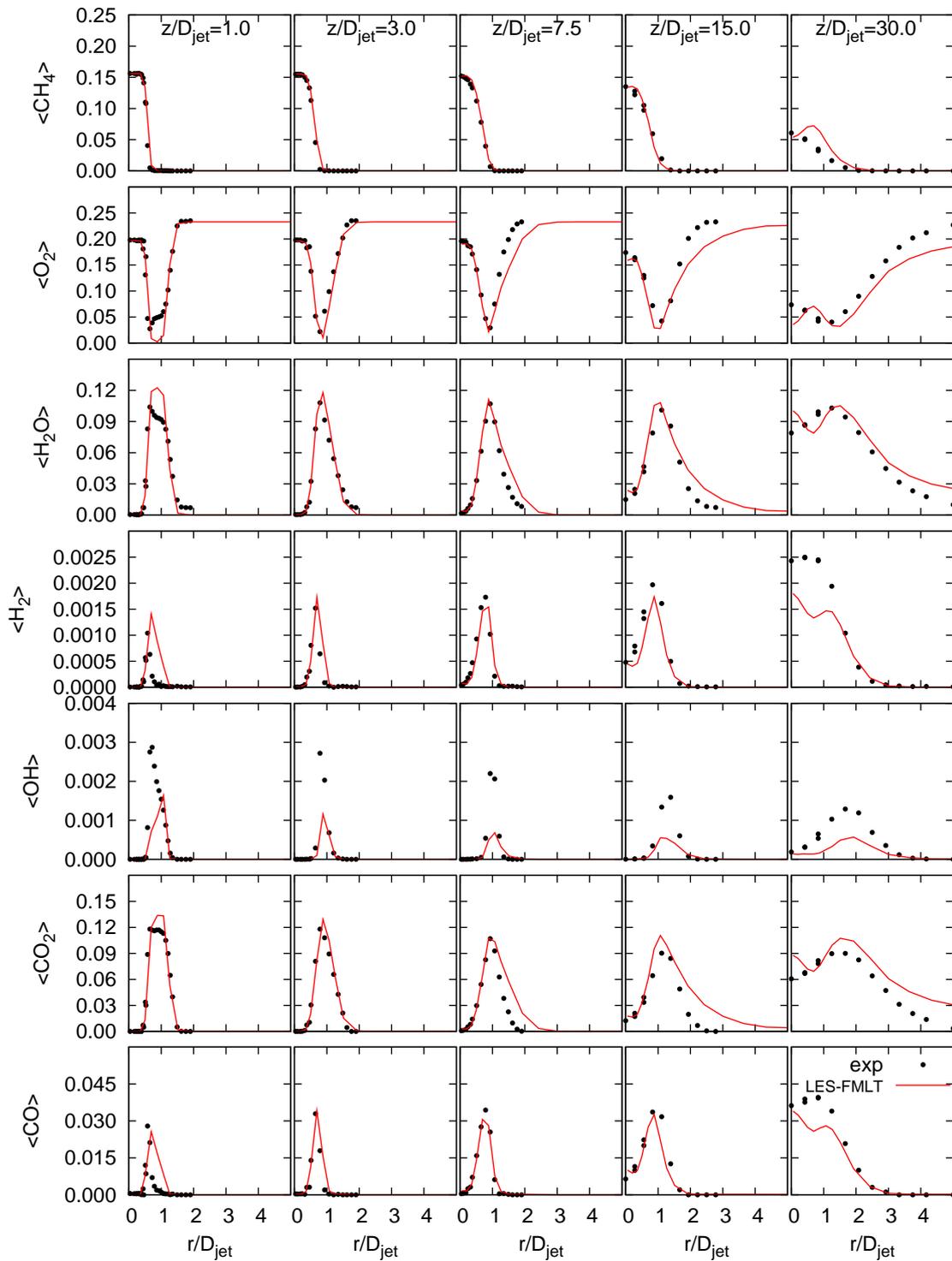


Fig. 7.11: Llama C; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en varias estaciones axiales.

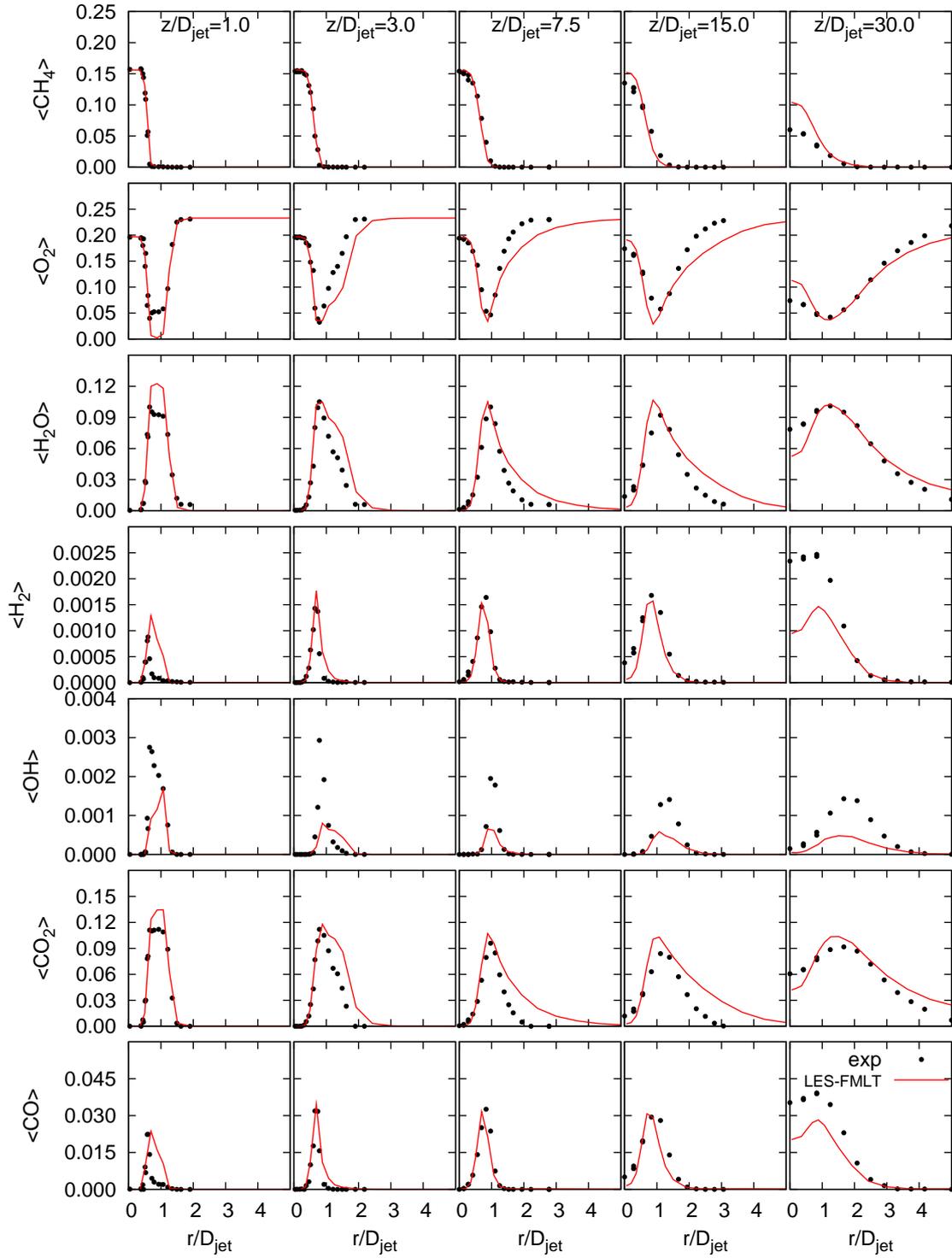


Fig. 7.12: Llama D; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en varias estaciones axiales.

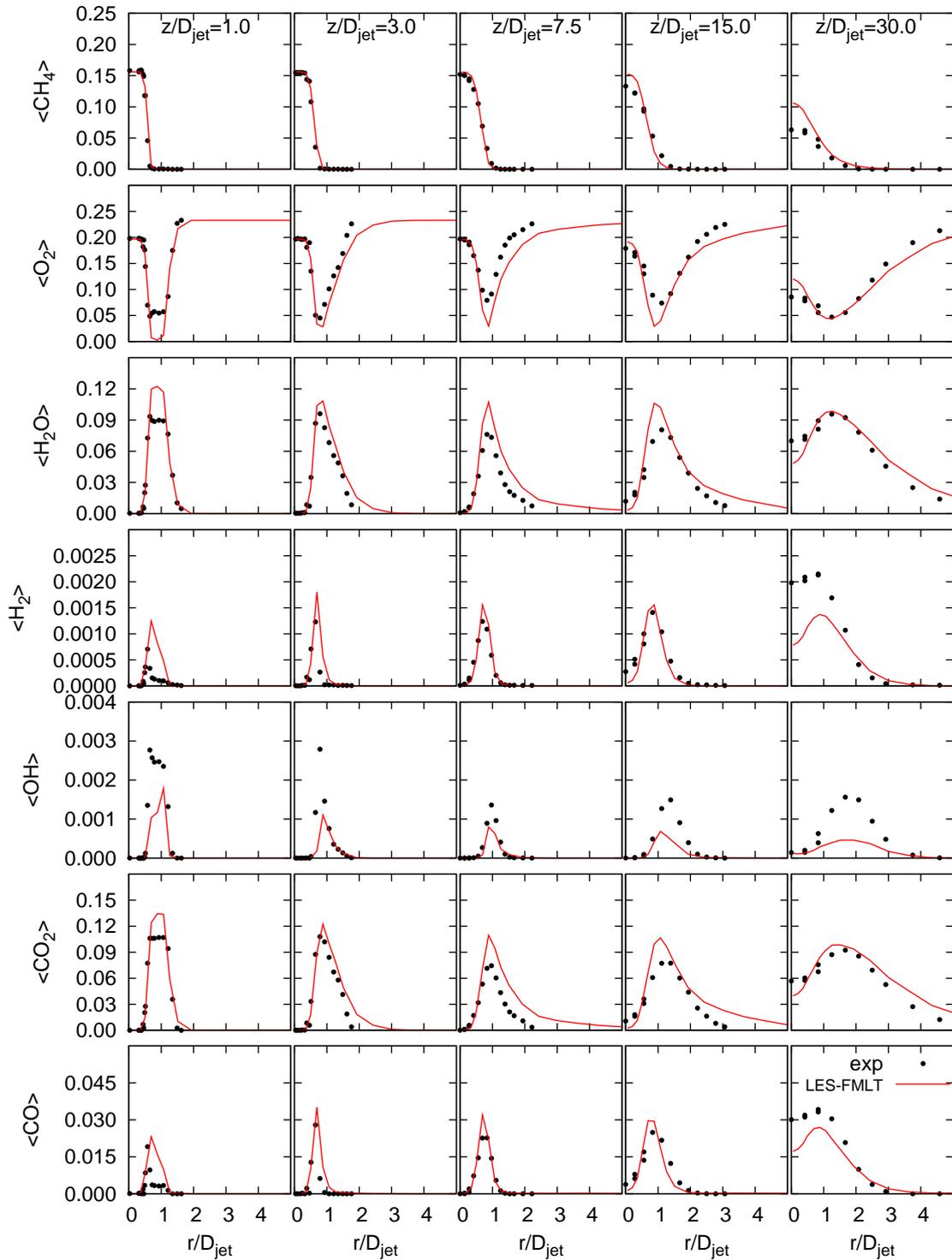


Fig. 7.13: Llama E; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en varias estaciones axiales.

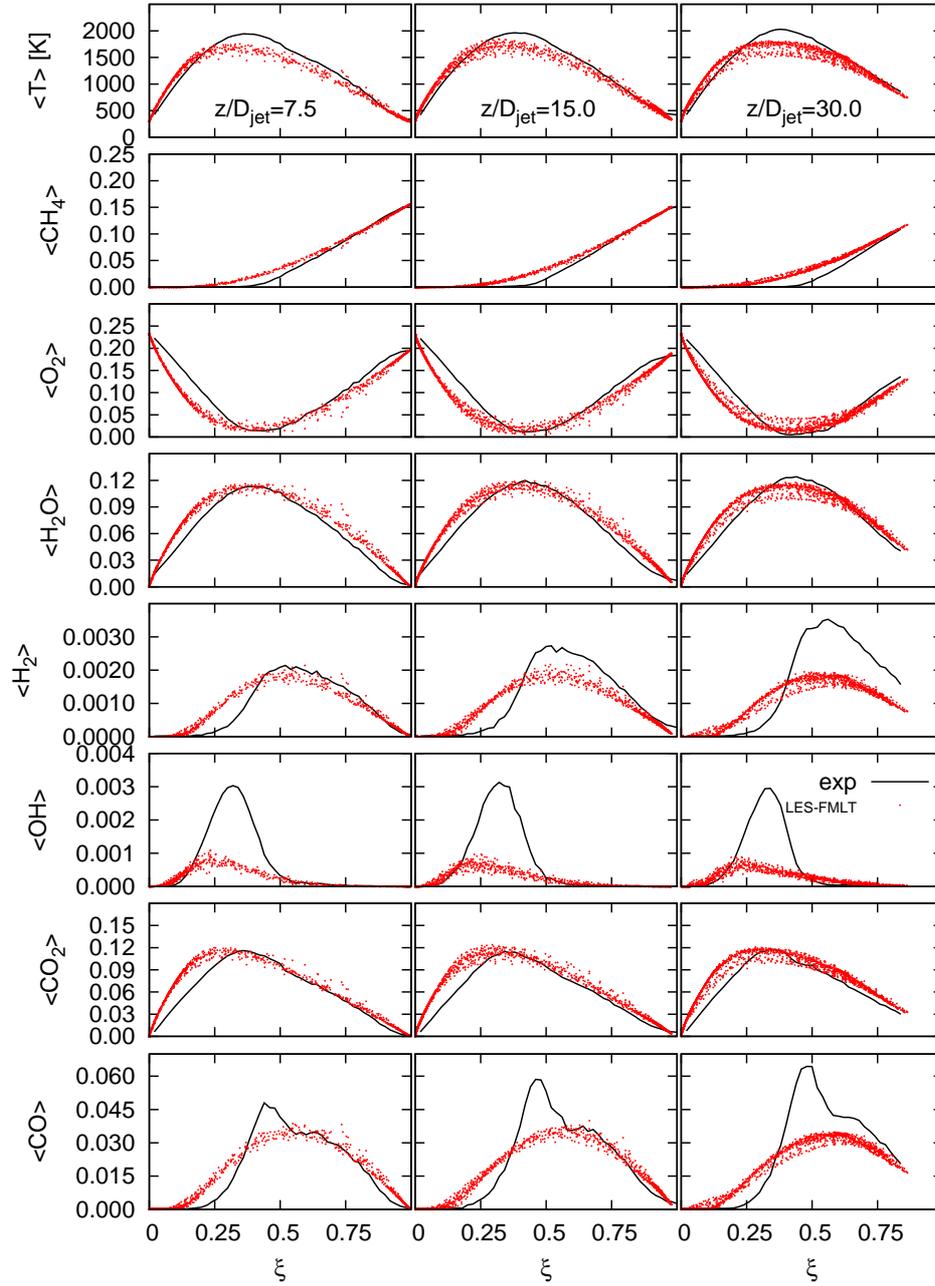


Fig. 7.14: Llama C; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.

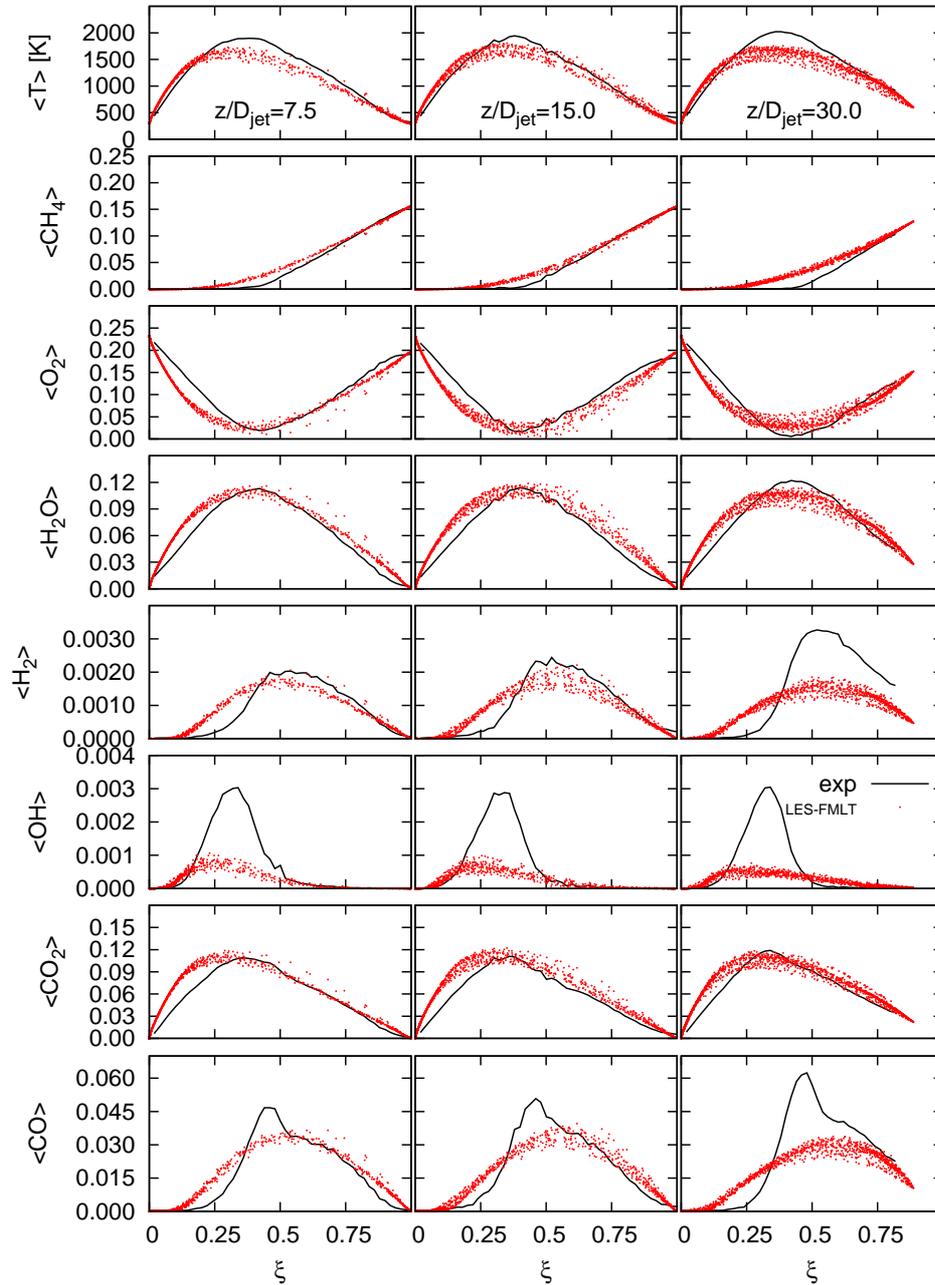


Fig. 7.15: Llama D; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.

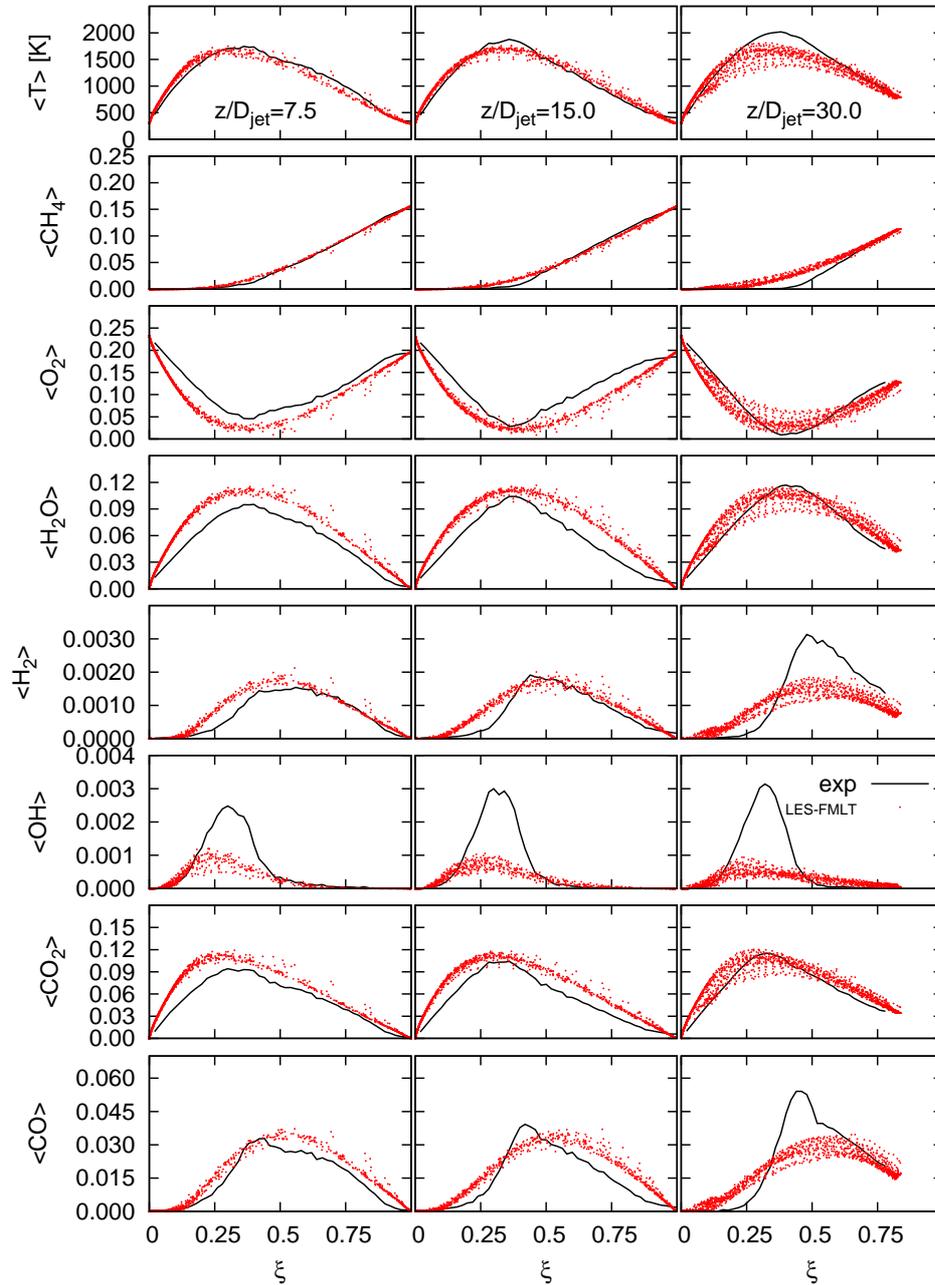


Fig. 7.16: Llama E; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.

Capítulo 8

Simulación con *S-LEM* reactivo

En este capítulo se presentan los resultados para las configuraciones C, D, y E de la llama turbulenta pilotada de difusión empleando el modelo *S-LEM* para modelar, junto a los procesos propios de mezcla, la combustión submalla. Este modelo se acopla a la solución de las ecuaciones de transporte en *LES* para determinar los campos filtrados de la fracción de mezcla, temperatura y demás escalares termoquímicos. En este caso, no se ha empleado una ecuación de transporte en *LES* para la fracción de mezcla; esta variable es determinada por *S-LEM*, al igual que el estado termoquímico del flujo, a través del modelado de los distintos procesos que intervienen en el transporte de los escalares, tanto a nivel de las escalas resueltas con el *splicing*, como a nivel submalla con los procesos de mezclado turbulento, difusión molecular y reacción química. Los campos submalla de los escalares y especies químicas son inicializados con distribuciones uniformes de los campos del flujo obtenidas mediante el modelado con flamelets. Los resultados obtenidos para los campos filtrados de velocidad y demás escalares son comparados con las mediciones experimentales y con los obtenidos en las simulaciones con flamelets.

8.1. Esquema de las simulaciones

En la Figura 8.1 se muestra un esquema de las simulaciones acoplando el *solver* de *LES* y el modelo *S-LEM* en su modalidad reactiva (Módulo *LES-LEM-R*). En ella se resumen las interacciones y variables involucradas en cada modelo. El propósito es dar mayor claridad en la lectura e interpretación de los resultados presentados en este capítulo. *S-LEM* determina la evolución de la fracción de mezcla, su varianza y tasa de disipación, así como el estado termoquímico del flujo que es usado por *LES* para determinar el campo de velocidades.

8.2. Campo instantáneo

En las Figuras 8.2 a 8.4 se muestran las distribuciones instantáneas de la velocidad axial, fracción de mezcla y temperatura para las llamas C, D y E. Los contornos permiten apreciar que la simulación captura los complejos fenómenos del flujo turbulento reactivo. El chorro manifiesta una

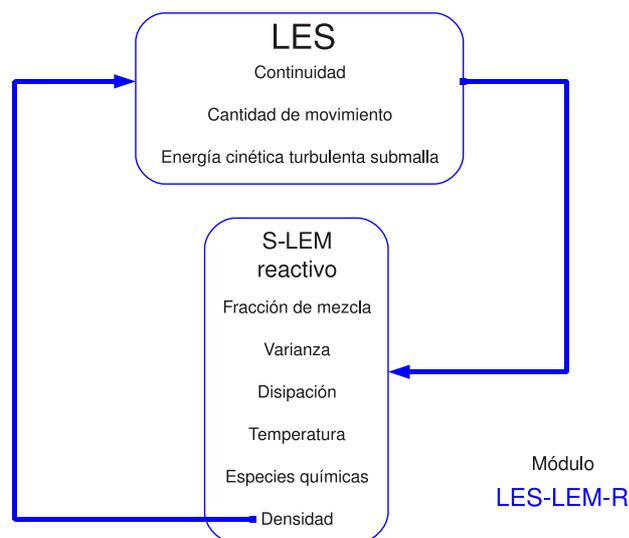


Fig. 8.1: *LES* y *S-LEM* reactivo. Esquema de las simulaciones.

longitud de penetración similar en las tres llamas, con cierta estabilidad hasta aproximadamente $15D_{jet}$ donde comienza a desestabilizarse. Entre $20D_{jet}$ y $30D_{jet}$ se produce el rompimiento del *jet* y a partir de esta posición hay un mezclado turbulento de las corrientes. Este comportamiento en los campos contrasta con el que manifiestan la predicciones con flamelets del capítulo anterior, donde las llamas presentan distintas longitudes de penetración en el chorro. El campo de temperaturas filtrado que se observa en la Figura 8.4 exhibe zonas con valores un poco más elevados que los observados con flamelets; por otra parte, también se aprecian en este caso zonas locales de extinción, más evidentes en las llama D y E.

En la Figura 8.5 se muestra, para la llama D, zonas instantáneas de reacción media que se determinan en el modelado usando el mecanismo químico de un paso (descrito en el Apartado 4.8.3). La línea sólida en la Figura localiza la posición de la fracción de mezcla estequiométrica. Como cabría esperar, existe una correspondencia entre el valor de ξ_{st} y las capas altamente reactivas del flujo, aunque también hay zonas que se intercalan en torno a la condición estequiométrica que manifiestan extinción. Hay una correspondencia, sobre todo inicialmente, con las capas de mezclado entre las corrientes de combustible y piloto que aguas abajo se pierde por la intensidad de la turbulencia en esa zona.

8.3. Resultados estadísticos del flujo

8.3.1. Velocidades

En la Figura 8.6 se muestran los perfiles de la velocidad media y *rms* de las componentes axial y radial en el eje central del dominio para las tres configuraciones junto con los correspondientes valores obtenidos con el modelo de flamelets y los datos experimentales. El decaimiento que se observa en la velocidad axial es similar al obtenido con flamelets en el caso de la llama C. En las tres llamas se presenta un perfil ligeramente por debajo de los valores experimentales y similares

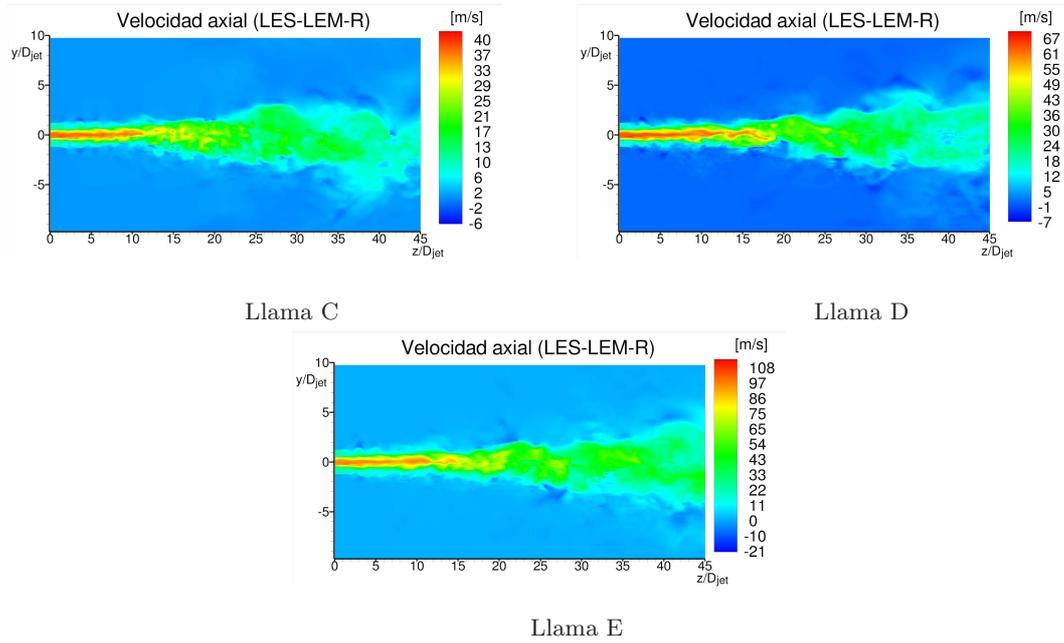


Fig. 8.2: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Distribución instantánea de la velocidad axial.

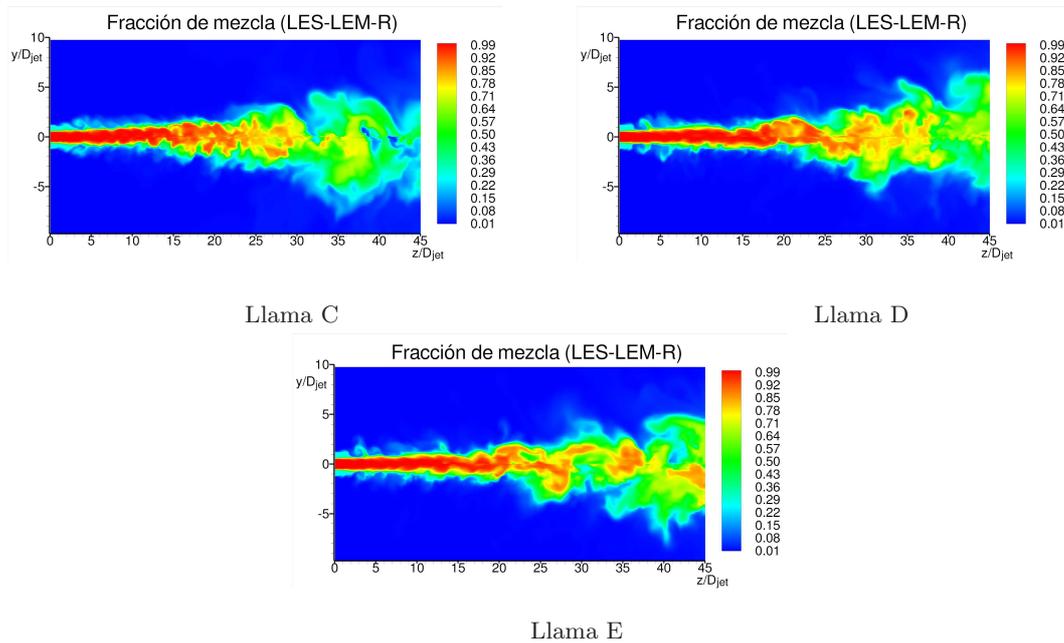


Fig. 8.3: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Distribución instantánea de la fracción de mezcla.

en forma. El acuerdo con los experimentos es adecuado y, comparado con las simulaciones con flamelets, hay apreciables mejorías en la predicción de la intensidad de las fluctuaciones. Una mejor perspectiva de la estadística del campo de velocidad en el flujo se puede observar en las Figuras 8.7 y 8.8. El nivel de correspondencia con los experimentos es notoriamente mejor que en las simulaciones con el modelo flamelets, sobre todo en la intensidad media de las fluctuaciones de

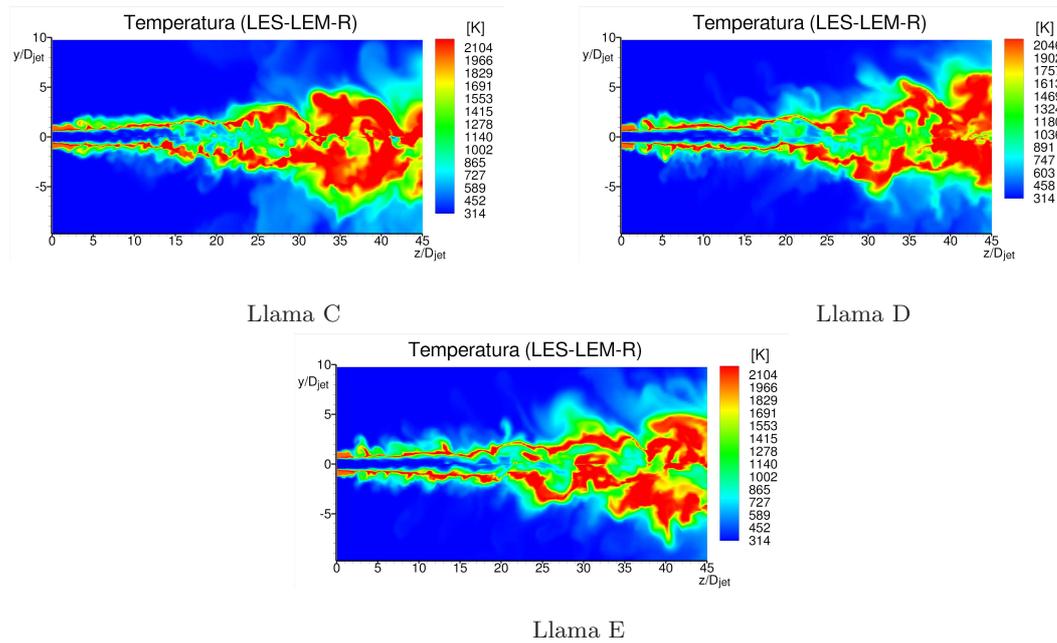


Fig. 8.4: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Distribución instantánea de la temperatura.

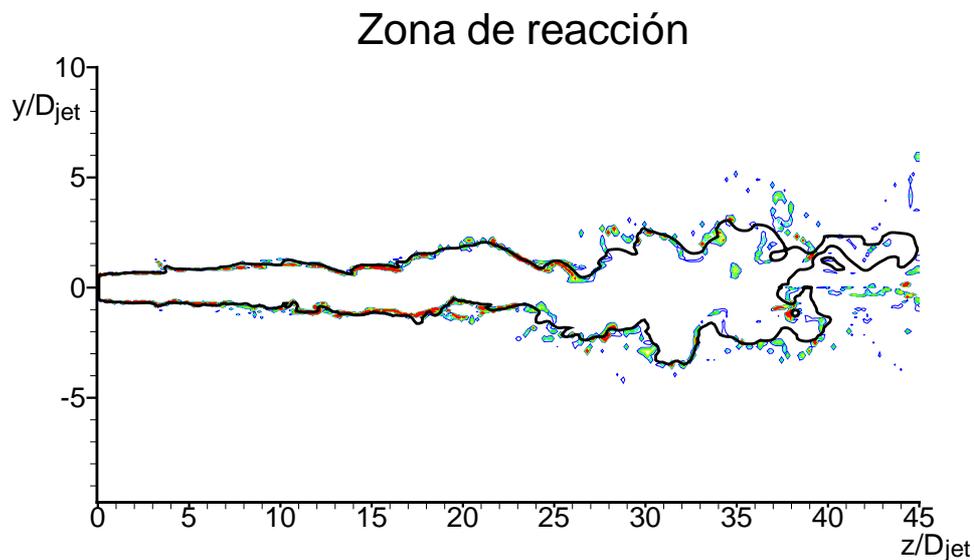


Fig. 8.5: Llama D; *LES* y *S-LEM* reactivo. Distribución instantánea de la zona de reacción química determinada por el mecanismo químico. La línea sólida muestra la localización de la fracción de mezcla estequiométrica

ambas componentes y en general en las últimas estaciones.

8.3.2. Escalares

En la Figura 8.9 se muestra el perfil de la fracción de mezcla y temperatura medias así como sus correspondientes valores *rms* en el eje central para las configuraciones C, D y E. Conviene recordar

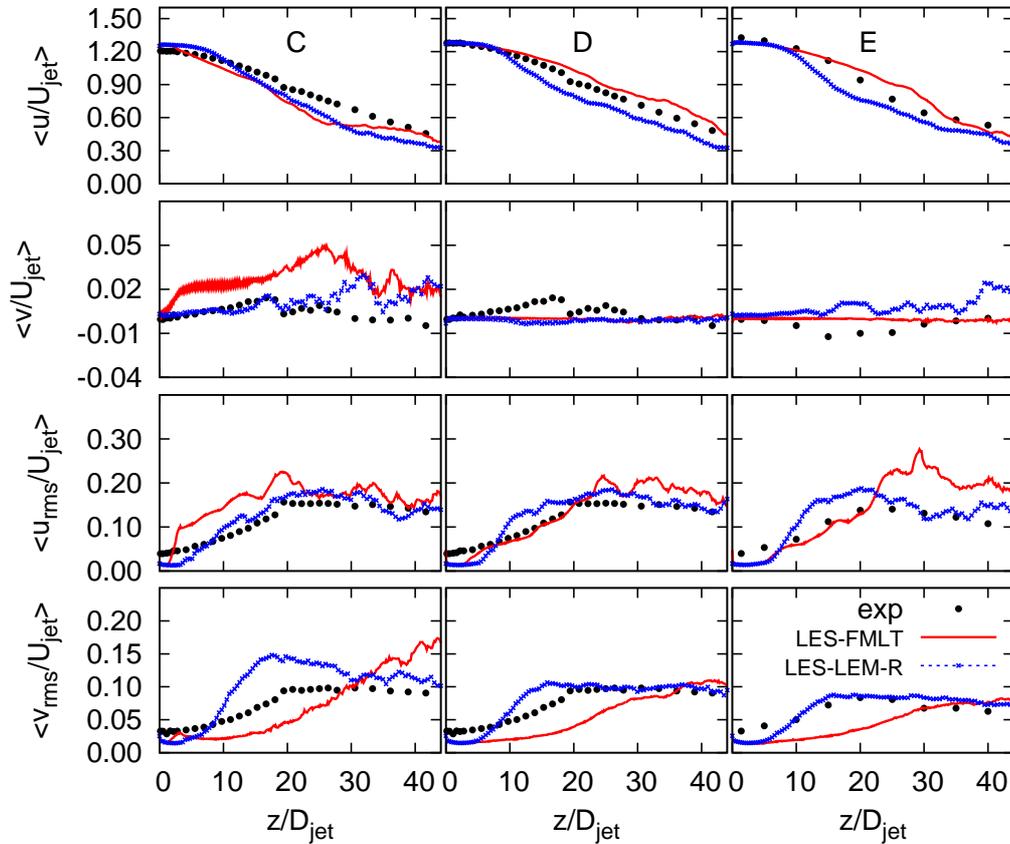


Fig. 8.6: Llamas C, D y E. *LES* y *S-LEM* reactivo. Perfiles de las velocidades axial y radial media y *rms* en el eje central.

que la evolución de los escalares está determinada exclusivamente por los procesos del modelo *S-LEM* y no hay propiamente ecuaciones en *LES* para estas variables. El nivel de acuerdo con los datos experimentales que presenta las simulaciones es mejor que el alcanzado con flamelets. El decaimiento en los perfiles de las variables medias es correctamente reproducido; para la intensidad media de las fluctuaciones, la temperatura presenta un nivel más alto que las experimentales, aunque muy próximas a las que se exhiben en el modelado con flamelets.

En las Figuras 8.10 y 8.11 se puede observar que el mismo nivel de acuerdo es válido para el resto del dominio. Los perfiles radiales de los escalares medios y *rms*, tanto de fracción de mezcla como de temperatura están muy próximos a los experimentales y prácticamente sólo en la última estación analizada ($30D_{jet}$) son ligeramente sobrestimados en algunos casos. En la estación más próxima a la boquilla, la temperatura media muestra un ligero pico en los valores máximos que no está presente en los experimentos ni en el modelado con flamelets. La zona corresponde a la unión de capas de mezcla entre las corrientes de combustible y piloto. Este valor elevado es atribuible al mecanismo químico, el cual tiende a determinar temperaturas un poco más elevadas en las zonas altamente reactivas, como las observadas en la Figura 8.5, que en este caso coinciden con la posición de este punto.

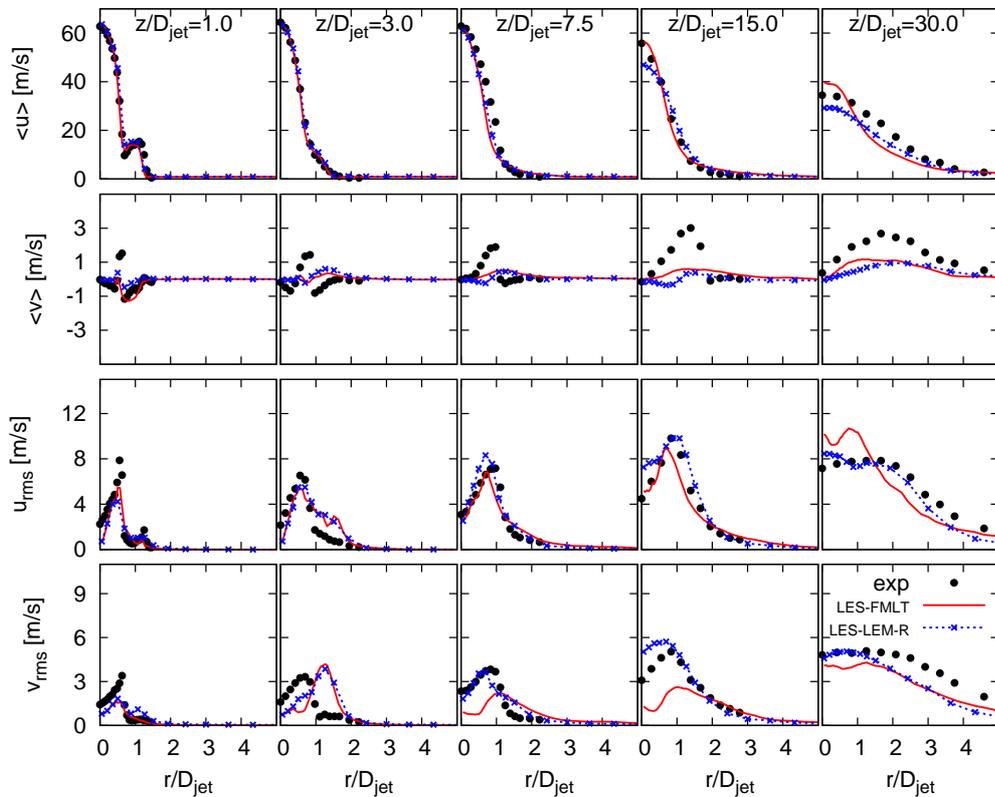


Fig. 8.7: **Llama D; LES y S-LEM reactivo.** Fluctuaciones medias y *rms* en las velocidades axial (u) y radial (v) en distintas estaciones axiales.

Los perfiles axiales de las fracciones másicas de las especies químicas se muestran en la Figura 8.12. El decaimiento axial de los reactantes CH_4 y O_2 es correctamente reproducido en la mayor parte del eje y sólo en la última sección (a partir de $30D_{jet}$) hay una sobrestimación con respecto a los experimentos. Análogamente, las especies producidas por la combustión, H_2O y CO_2 , muestran deficiencias en esta zona. Sin embargo, el nivel de acuerdo es similar al obtenido con flamelets y, en muchos casos, más próximo a los perfiles experimentales.

Una idea completa del cálculo de las especies químicas en diferentes zonas del dominio se puede obtener de las Figuras 8.13 a 8.15. La predicción con *S-LEM* muestra un adecuado acuerdo con los datos experimentales en las tres configuraciones y, en general, mejora el obtenido con flamelets en varias posiciones axiales. En la estación más cercana a la boquilla ($z/D_{jet}=1$), en la zona de mezcla entre *jet* y piloto, la predicción coincide con las mediciones experimentales y corrige el ligero deterioro que muestran los perfiles de flamelets en estas zonas. Solo en última estación, en concordancia con lo observado en los perfiles axiales, se presentan discrepancias en el cálculo de las especies en torno al eje central.

En las Figuras 8.16 a 8.18 se muestran, en espacio de ξ , la temperatura y especies químicas determinadas en los segmentos radiales localizados en tres posiciones axiales del dominio. La dispersión de puntos proviene de las medias temporales en las celdas de *LES* de los valores medios

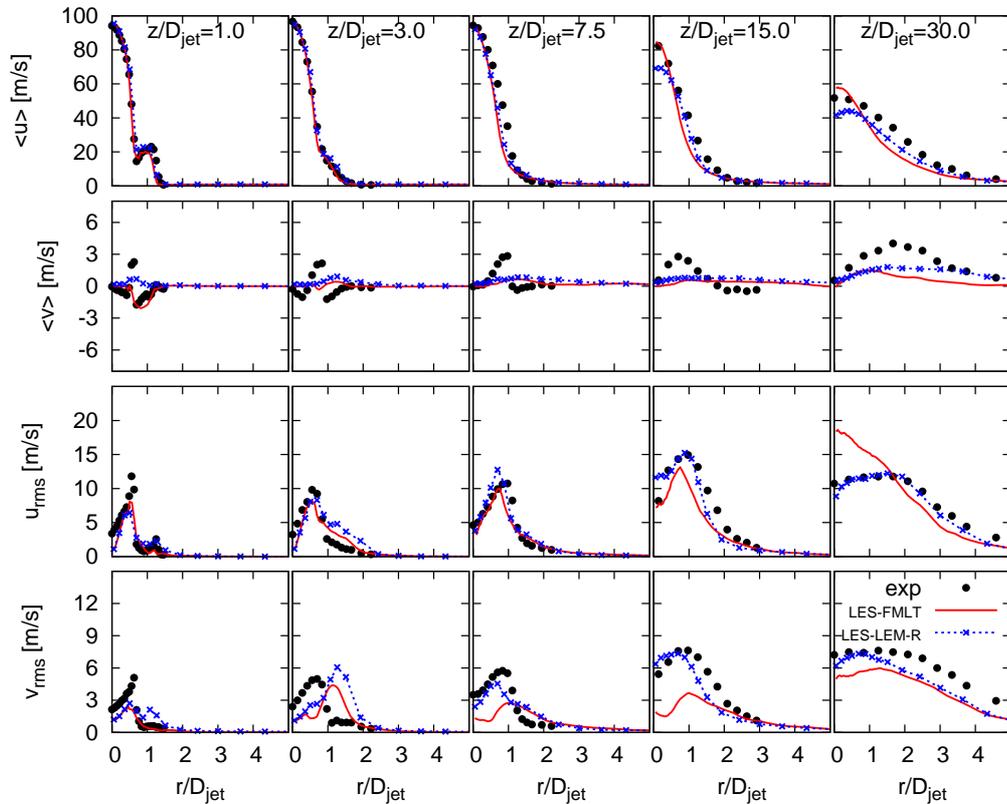


Fig. 8.8: **Llama E; LES y S-LEM reactivo.** Fluctuaciones medias y *rms* en las velocidades axial (u) y radial (v) en distintas estaciones axiales.

del dominio submalla correspondiente¹. Los escalares en general son adecuadamente determinados comparados con la media experimental condicionada, aunque con algunas deficiencias en las zonas centrales.

La dispersión submalla en el dominio unidimensional de los escalares químicos, se presenta en la Sección 9.2 del siguiente capítulo.

8.4. Conclusiones

En este capítulo se han mostrado y discutido los resultados obtenidos para las llamas C, D y E empleando el modelo *S-LEM* reactivo para modelar el campo de escalares y procesos submalla asociados a la combustión turbulenta del flujo. En general, los resultados obtenidos permiten evaluar satisfactoriamente el acoplamiento de esquemas y algoritmos numéricos de los modelos. El campo instantáneo reproduce los fenómenos complejos de la turbulencia y la estadística global del flujo concuerda adecuadamente con las mediciones experimentales. La predicción del estado termoquímico y campo de escalares concuerda mayoritariamente con lo observado experimentalmente con ligeras discrepancias, lo cual confirma que la reacción de combustión es apropiadamente reproducida por el mecanismo químico global de un paso.

¹Equivale a las medias temporales de los valores filtrados.

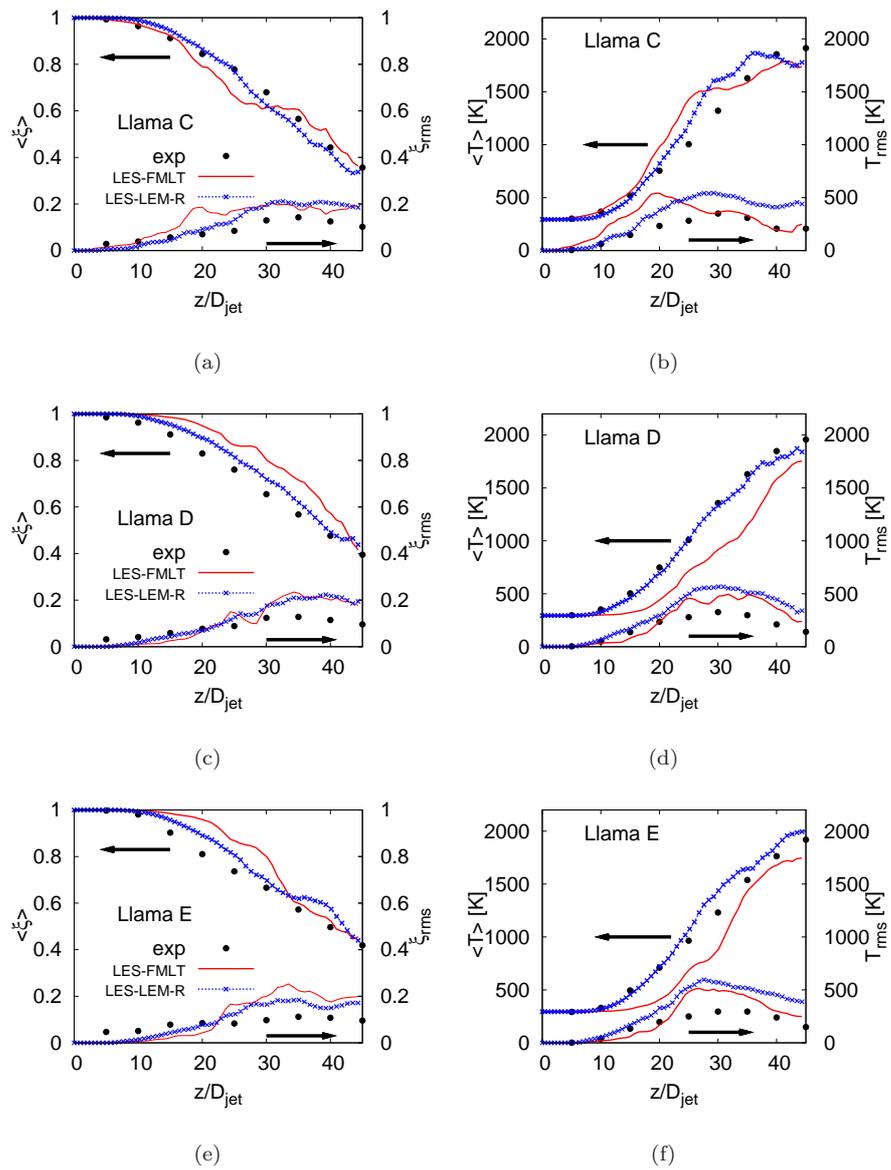


Fig. 8.9: **Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo.** Perfiles de la fracción de mezcla y temperatura medias y *rms* en el eje central.

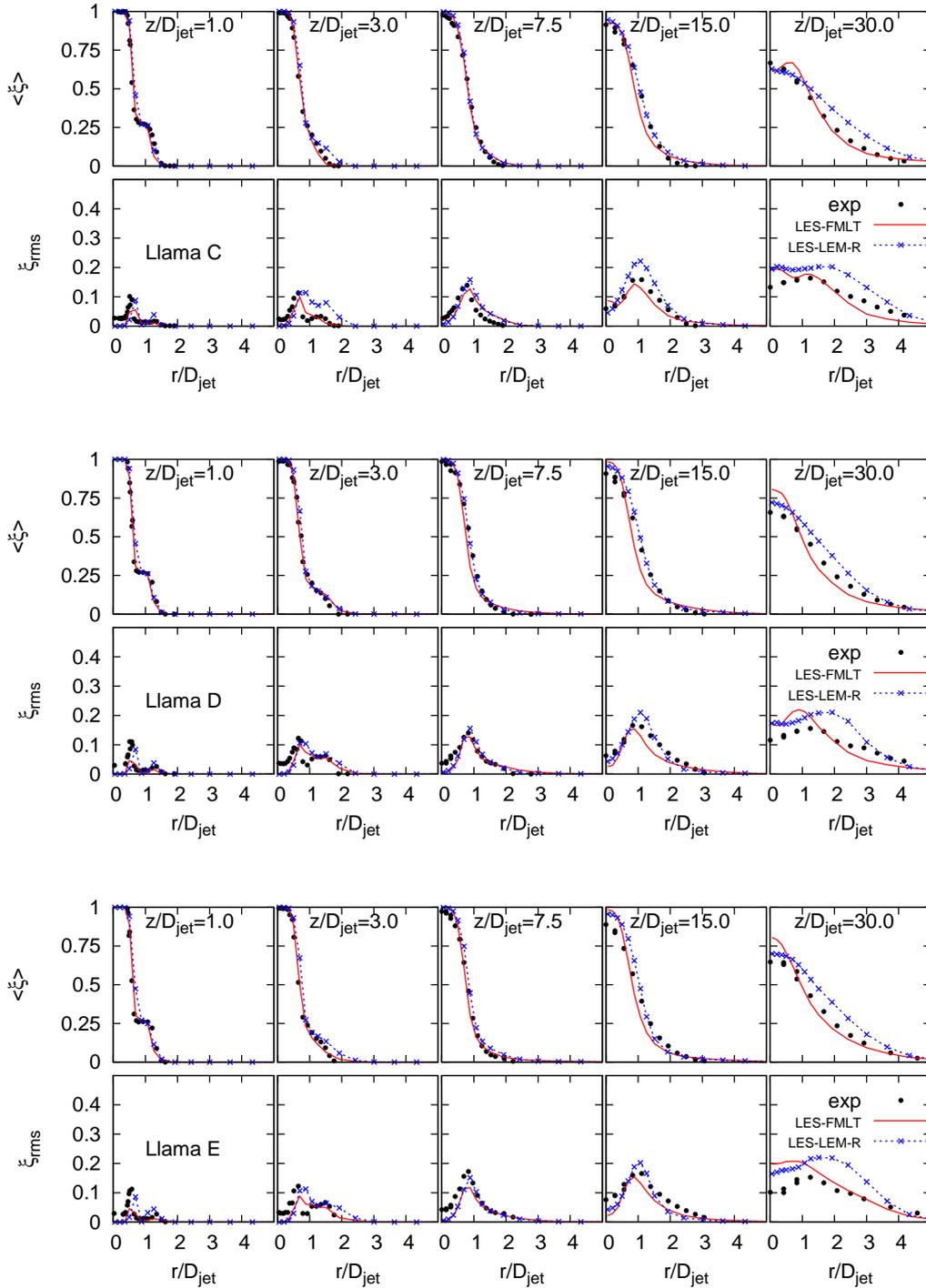


Fig. 8.10: **Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo.** Perfiles radiales de la fracción de mezcla media y *rms* en distintas estaciones axiales.

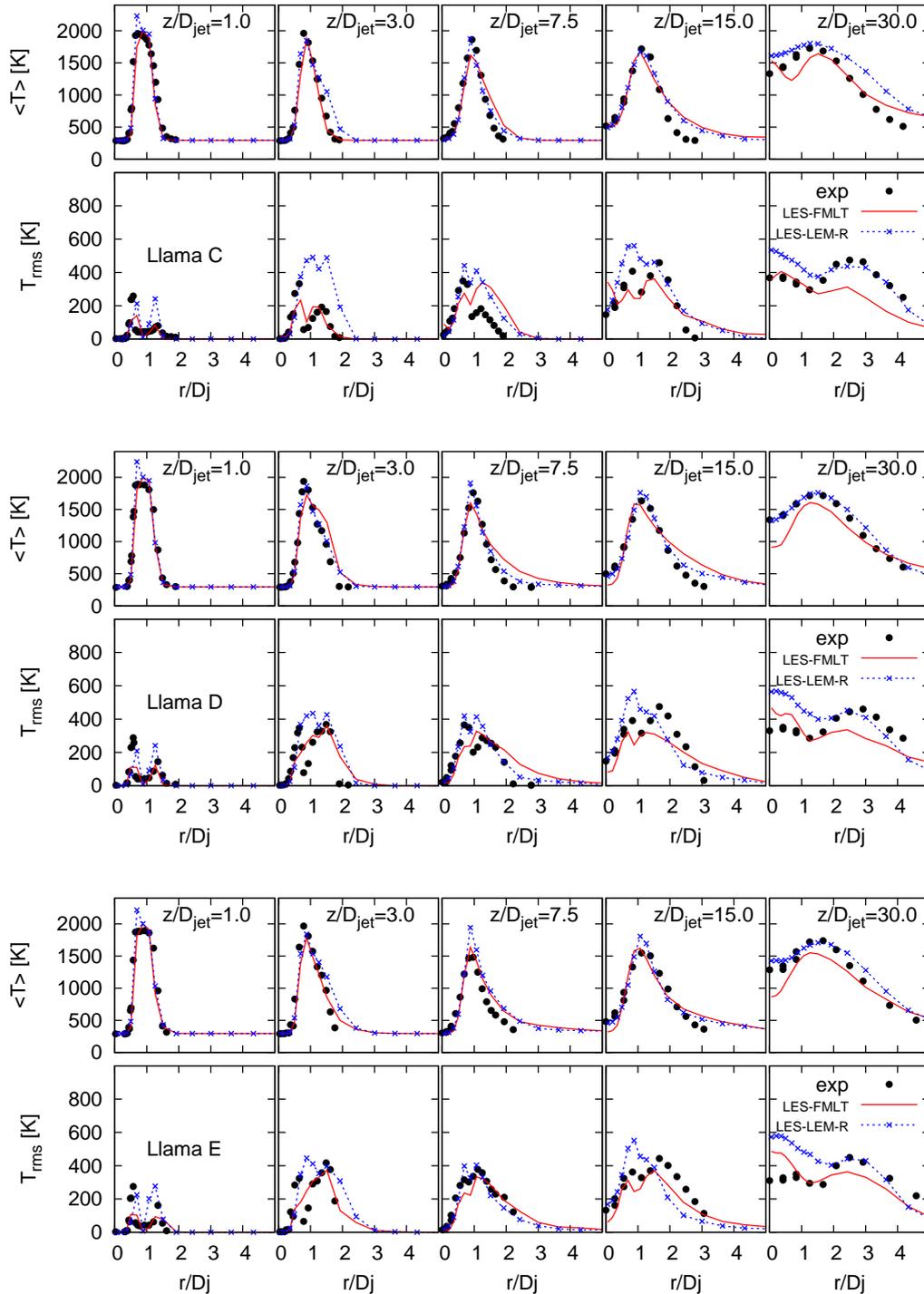


Fig. 8.11: **Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo.** Perfiles radiales de la temperatura media y rms en distintas estaciones axiales.

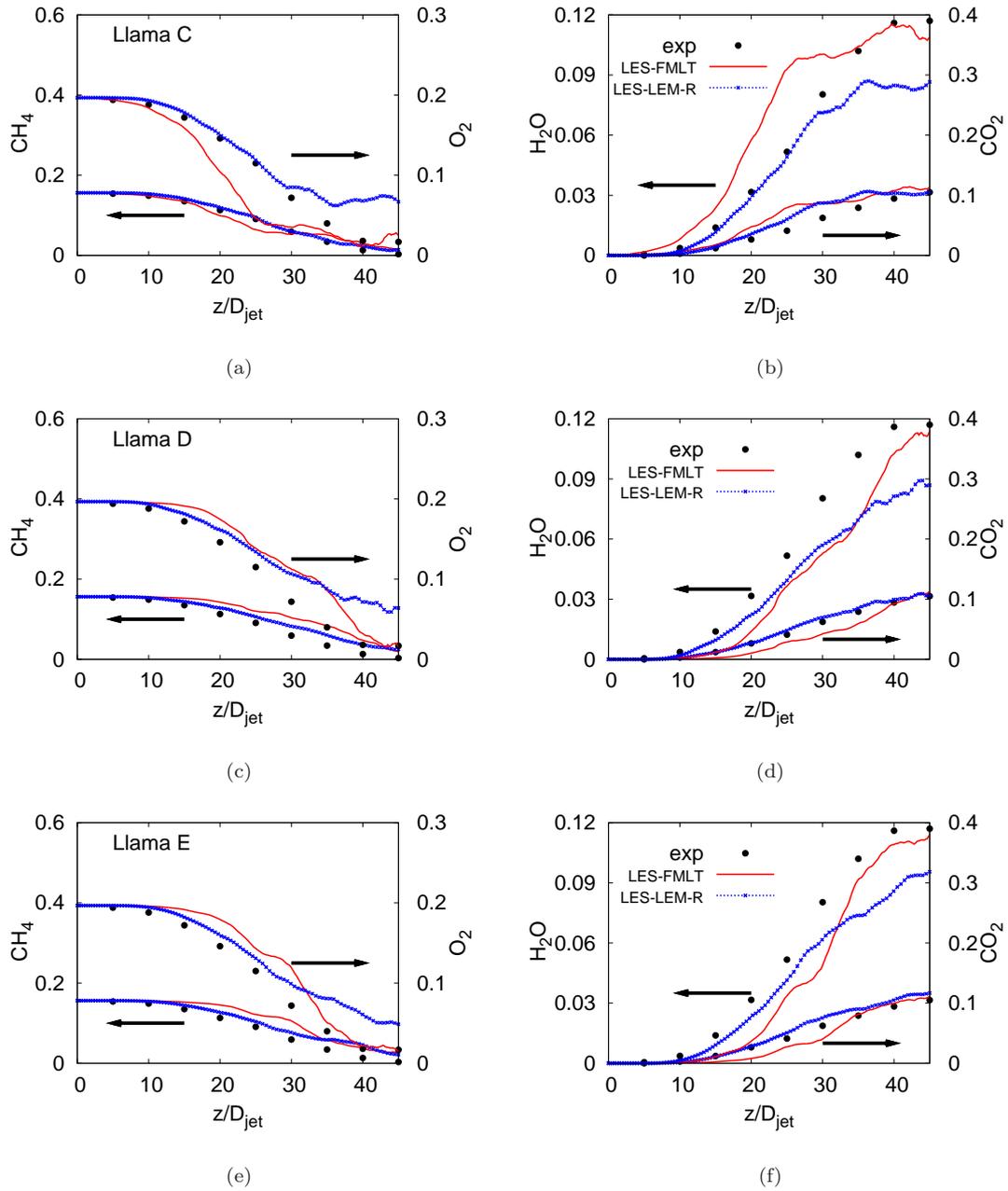


Fig. 8.12: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Distribución de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 en el eje central.

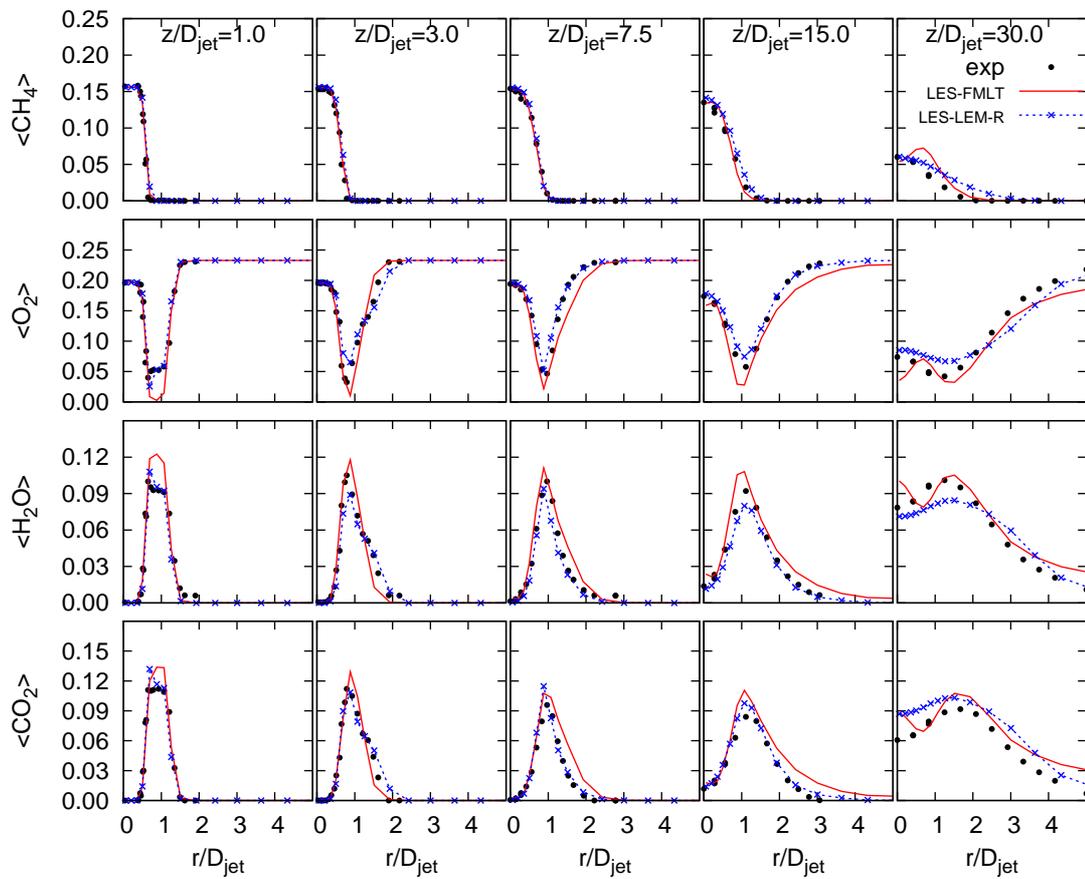


Fig. 8.13: **Llama C; LES y S-LEM reactivo.** Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , y CO_2 medios en varias estaciones axiales.

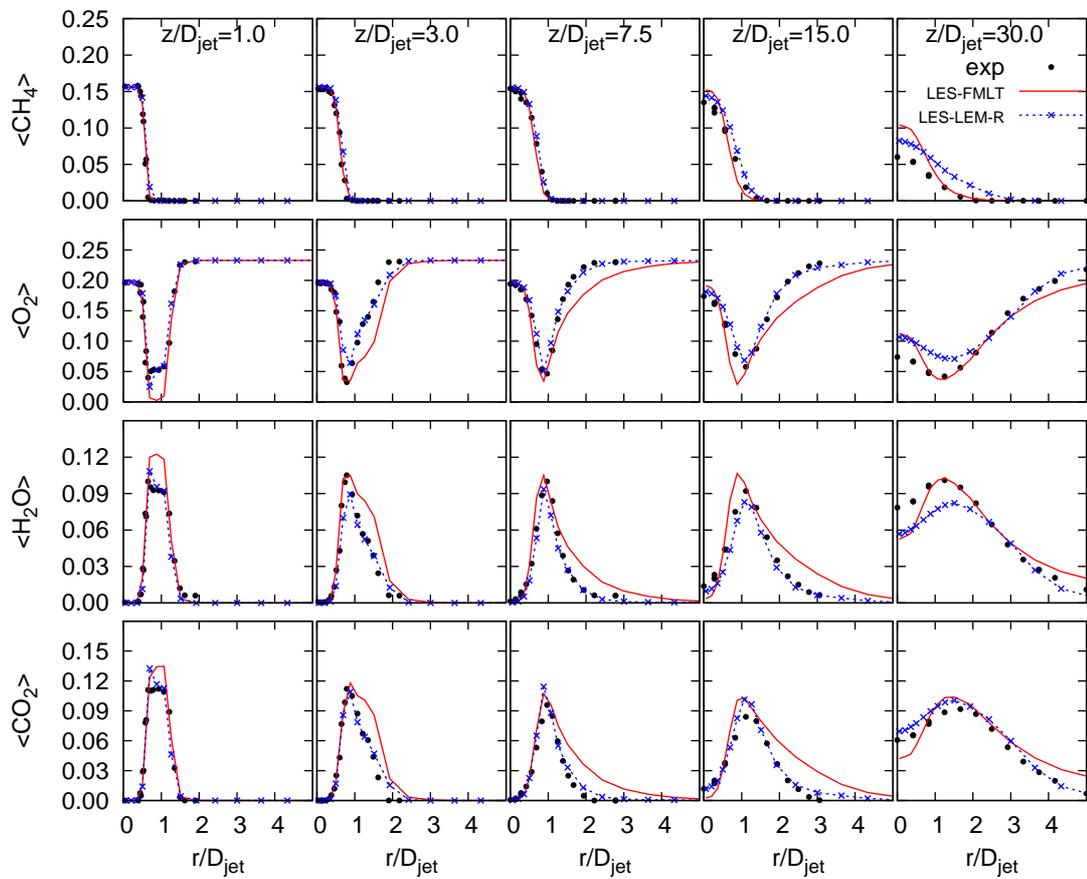


Fig. 8.14: **Llama D; LES y S-LEM reactivo.** Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , y CO_2 medios en varias estaciones axiales.

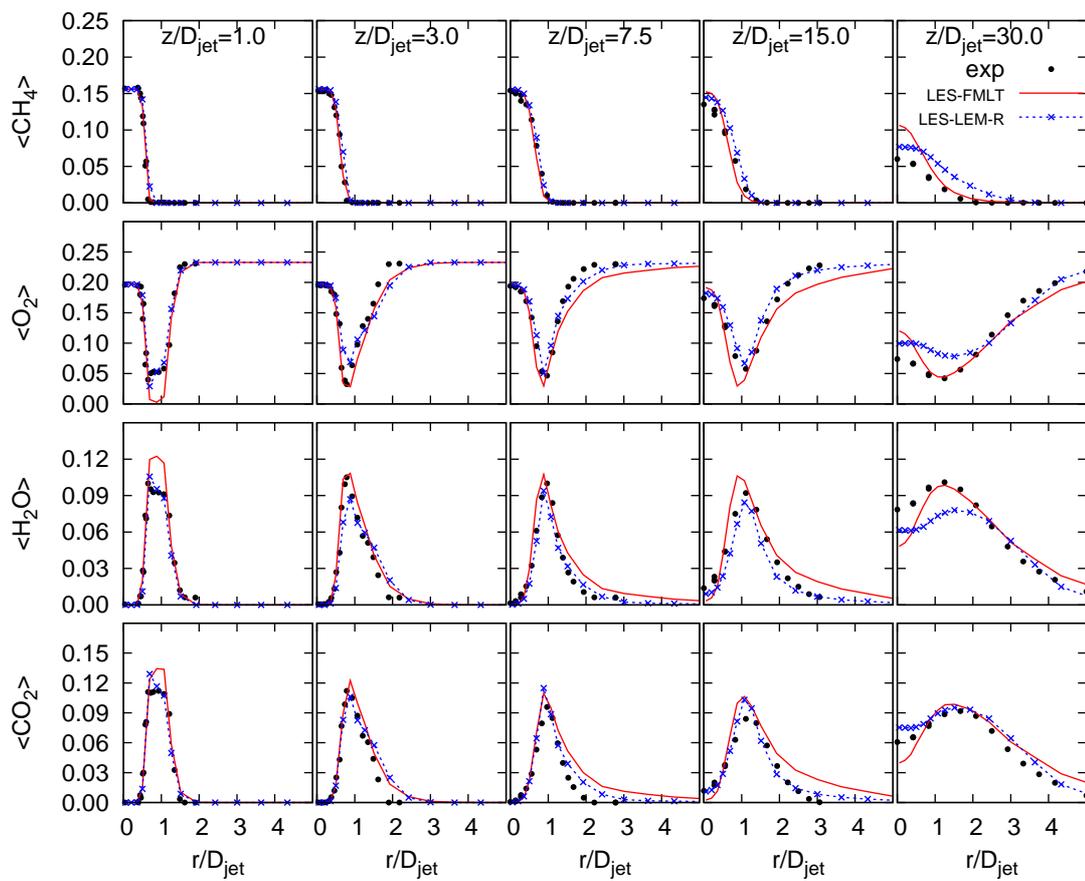


Fig. 8.15: **Llama E; LES y S-LEM reactivo.** Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , y CO_2 medios en varias estaciones axiales.

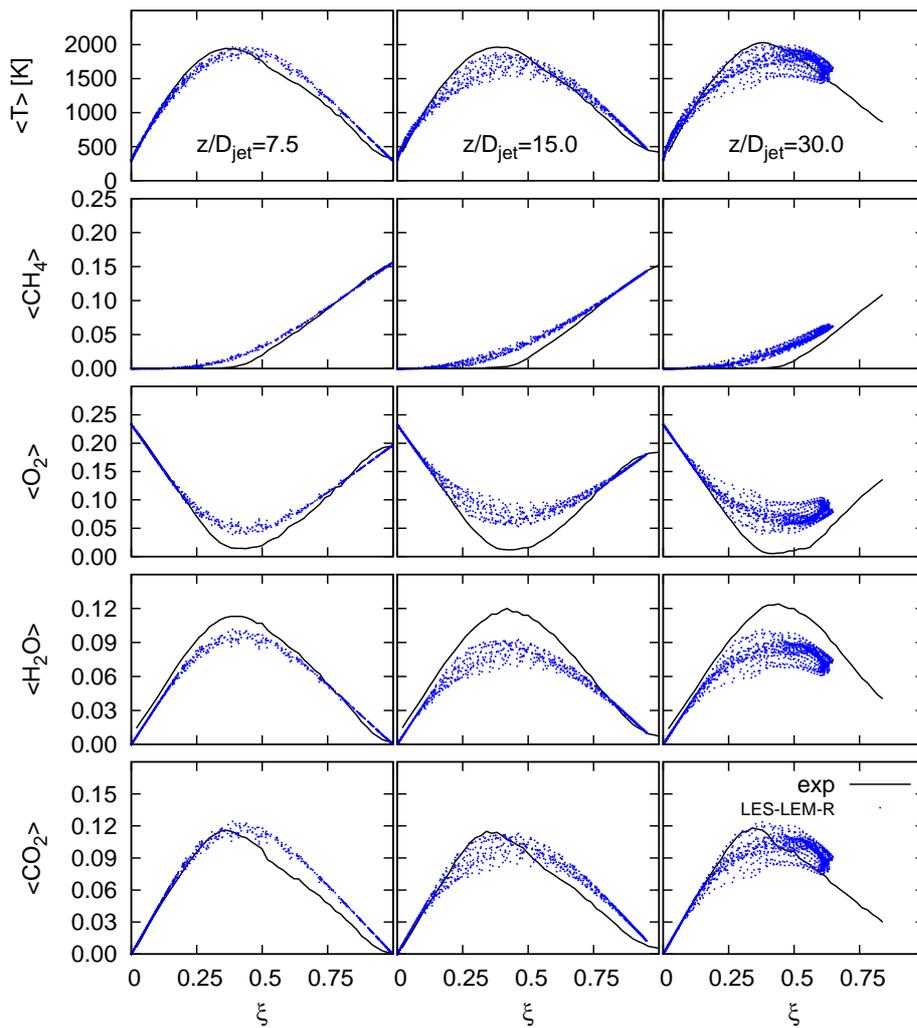


Fig. 8.16: **Llama C**; *LES* y *S-LEM* reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.

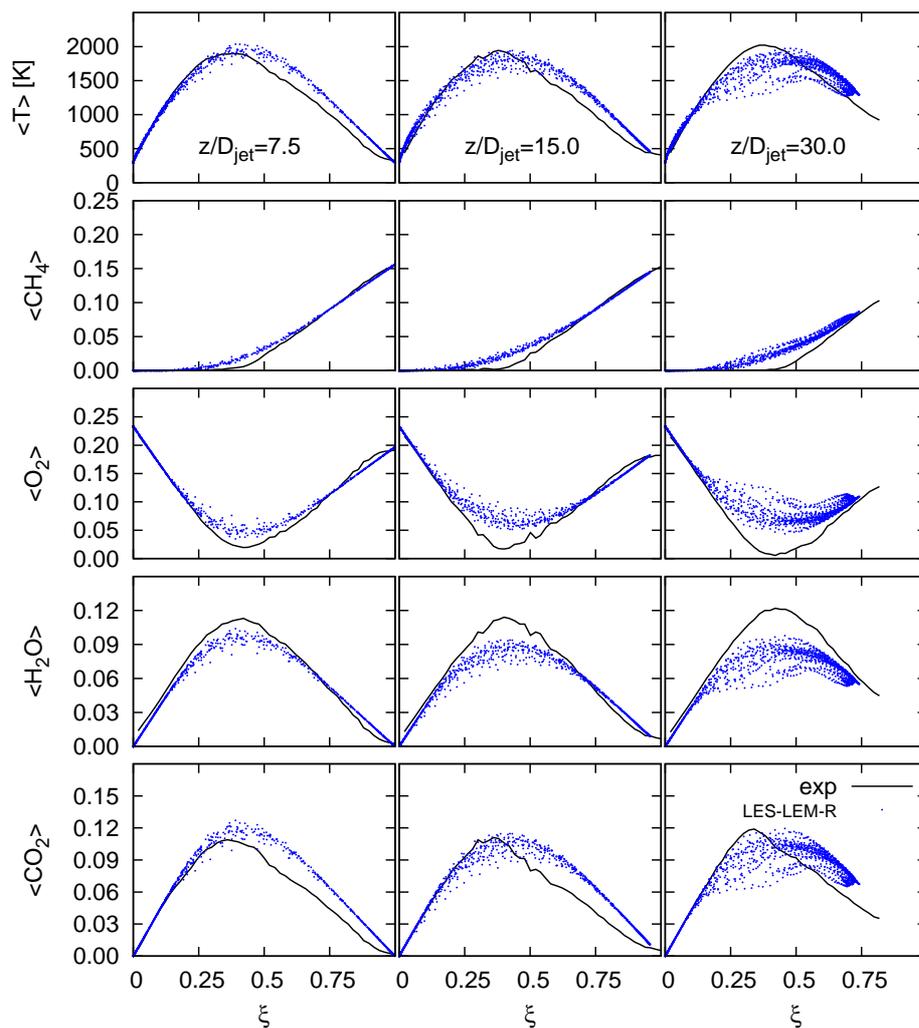


Fig. 8.17: **Llama D**; *LES* y *S-LEM* reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.

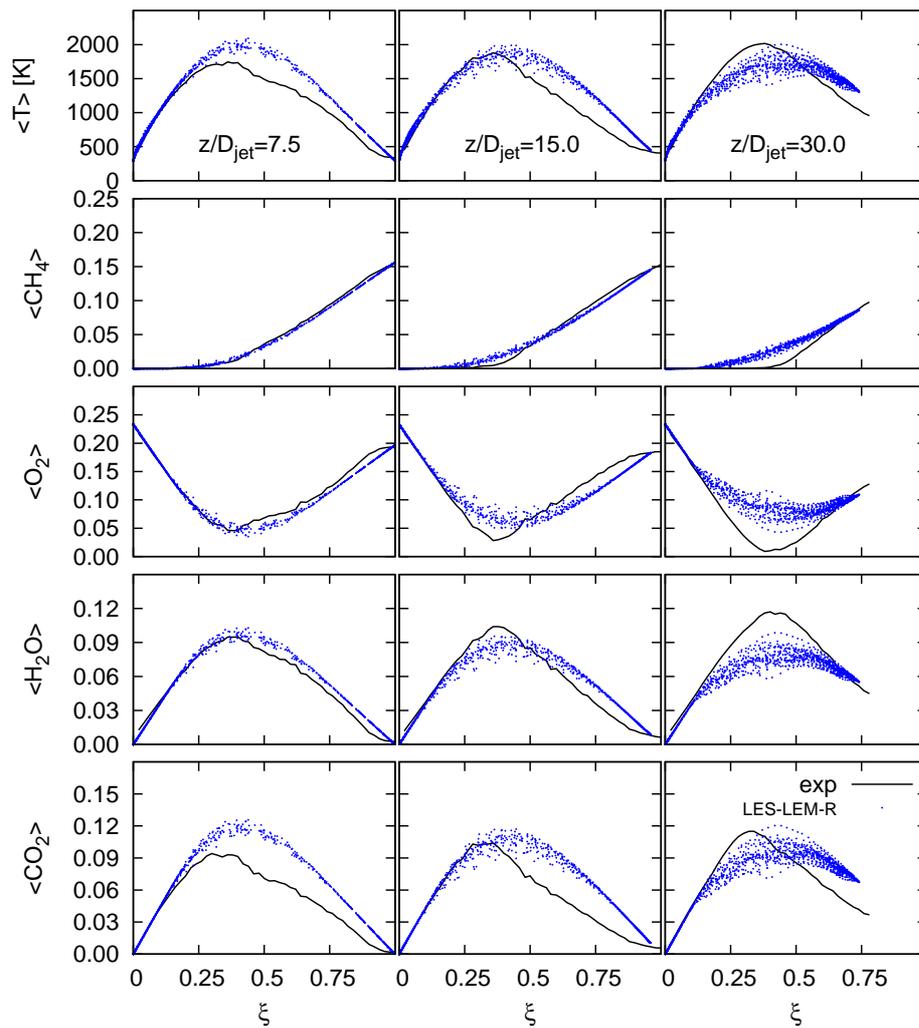


Fig. 8.18: **Llama E**; *LES* y *S-LEM* reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.

Capítulo 9

Propiedades del campo submalla

Un aspecto clave en la simulación de flujos turbulentos reactivos es la determinación de las interacciones entre la turbulencia y la cinética química. Estas ocurren en las escalas más pequeñas y, por tanto, habitualmente su efecto es modelado. En *S-LEM* el dominio submalla inmerso en cada celda corresponde a una discretización unidimensional que resuelve y captura estas escalas. En este capítulo se analiza la estructura submalla del campo de escalares. El análisis se ha separado según el tipo de simulación de donde proceden los resultados (*S-LEM* modalidad no reactiva o reactiva) La mayor parte del análisis se centra en torno a la estructura de los campos de los dominios submalla en *S-LEM*, principalmente la relacionada con la tasa de disipación de la fracción de mezcla, para la cual existen mediciones experimentales en las tres llamas analizadas.

9.1. Simulación con flamelets y *S-LEM* no reactivo

9.1.1. Varianza y tasa disipación submalla de los campos filtrados.

En esta sección se analiza el comportamiento de la varianza y de la tasa de disipación de la fracción de mezcla obtenida a partir de información extraída del campo filtrado. Se han empleado tres estrategias de modelado para estas variables (Apartado 4.6.3):

- deducción de una ecuación de transporte para la varianza submalla ξ_v^2 (Ecuación 4.47) y modelado de la tasa de disipación $\tilde{\chi}$ (Ecuación 4.51) [102];
- hipótesis de equilibrio local (Ecuaciones 4.48 y 4.50) [22, 23, 88, 187];
- deducción de una ecuación de transporte para el segundo momento de la fracción de mezcla $\tilde{\xi}^2$ y posteriormente calcular la varianza ξ_v^2 mediante la definición (4.42) y la disipación $\tilde{\chi}$ con la Ecuación (4.52) [210].

La varianza y la tasa de disipación obtenida mediante estos modelos se compara con las determinadas por *S-LEM* no reactivo¹.

En la Figura 9.1 se muestran los perfiles radiales de los valores medios de varianza (ξ_v^2) y tasa de disipación ($\tilde{\chi}$) de la fracción de mezcla determinados mediante las estrategias de modelado anteriormente definidas y con *S-LEM*. En todos los casos, las variables han sido promediadas en el tiempo. La figura incluye radialmente la zona del *jet* y piloto, alrededor del eje central (hasta $1.5D_{jet}$) en las cinco posiciones axiales señaladas. La predicción de la varianza muestra tendencias similares en todos los modelos, aunque con discrepancias en la magnitud de los valores. *S-LEM* predice los valores más bajos de varianza, cercanos al modelo de equilibrio. El nivel de varianza en el dominio submalla está relacionado, por un lado, con el carácter aleatorio del intercambio de elementos en el proceso de *splicing*, principal generador de los gradientes submalla, y por otro, con la relación de frecuencias entre procesos de *triplet map* y difusión submalla en el modelo (ver Apéndice B). En todo caso, las discrepancias en los perfiles de la varianza de ξ no parecen afectar el cálculo de la tasa de disipación, ya que los modelos muestran un conveniente acuerdo entre ellos.

En la Figura 9.2 se muestran distribuciones instantáneas de la tasa de disipación de ξ para la llama D determinada por los cuatro procedimientos. Su distribución está influenciada por los gradientes en las capas de mezcla entre la corriente piloto y el chorro de combustible, principalmente cerca de la boquilla. Entre 15 y $20D_{jet}$, la turbulencia del flujo comienza a deformar la orientación de las estructuras formadas y tiende a dispersarlas hacia otras zonas del flujo.

El acuerdo entre modelos también puede verse reflejado en la Figura 9.3 donde se compara la tasa de disipación media obtenida por los distintos modelos en tres estaciones axiales ($z/D_{jet}=7.5, 15$ y 30) y son promediadas condicionando la variable con la fracción de mezcla. En la figura se incluyen las mediciones experimentales obtenidas por Karpetis y Barlow² [107]. El acuerdo entre los modelos y los datos experimentales es bueno en las tres posiciones, manteniendo la tendencia y rango de los datos experimentales; sin embargo, la forma de “doble pico” [106, 107] en torno al punto estequiométrico ($\xi_{st}=0.351$) que se observa en los experimentos no logra ser reproducida por ningún procedimiento.

9.1.2. Distribución submalla de la tasa de disipación

Las funciones de densidad de probabilidad (*PDFs*) de la tasa de disipación, construidas mediante el promediado condicionado con los valores en torno a la fracción de mezcla estequiométrica, son mostradas en la Figura 9.4. Las *PDFs* son dibujadas en escala logarítmica en el eje de las ordenadas puesto que la tasa de disipación χ esta distribuida en un amplio rango de valores en las llamas turbulentas [106] (típicamente $\chi \in [10^{-5}; 10^3]$). El promediado condicionado de los datos numéricos se ha hecho en el mismo rango que para los valores experimentales ($0.33 < \xi < 0.37$). La forma de la *PDF*($\chi|\xi_{st}$) esperada según estudios [48, 175] es una distribución lognormal, sin embargo, representada en ordenadas logarítmicas se muestra como una curva gaussiana. La campana de

¹Módulo LES-LEM-NR de acuerdo a la Figura 7.1. Las ecuaciones están en el Apartado 4.7.3.

²Los datos experimentales aún están bajo estudio [9]; no existe una estimación de la incertidumbre y no se sabe con certeza el efecto del ruido y del promediado espacial. De acuerdo con los autores del estudio, hay una mayor certeza para valores de χ determinados en un rango $0.4 \geq \xi \leq 0.6$. Los resultados que han obtenido posteriormente (aún no publicados hasta el momento de realizar esta tesis) indican que los datos no variarán significativamente en este rango cuando se apliquen las correcciones por ruido y resolución espacial. Los detalles de los estudios experimentales, se pueden consultar las referencias [106, 107, 272].

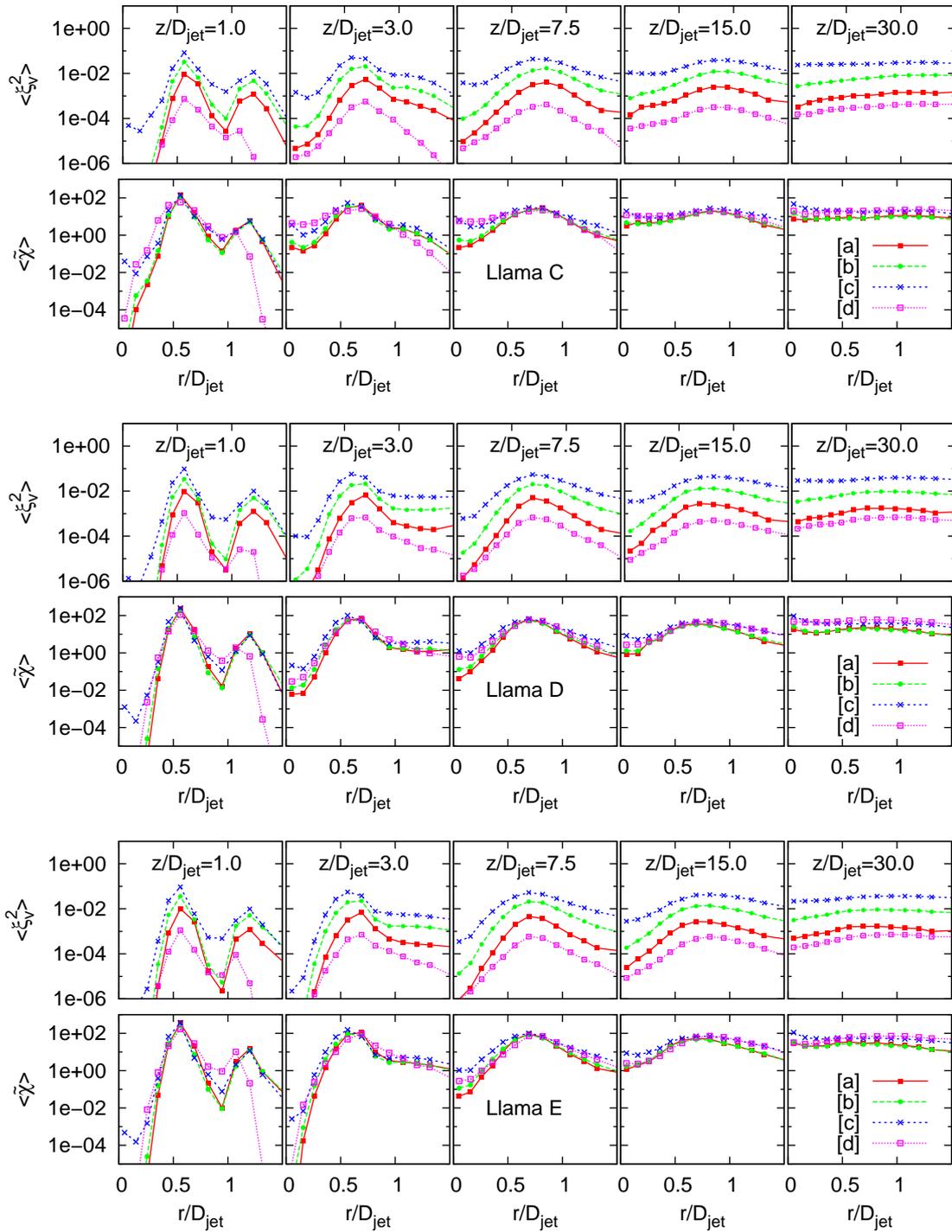


Fig. 9.1: **Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo** Perfiles radiales de la varianza y tasa de disipación de ξ en distintas estaciones axiales determinadas por *LES* y *S-LEM*. Las cantidades están promediadas en el tiempo. [a] hipótesis de equilibrio local, [b] ecuación para ξ^2 , [c] ecuación para $\tilde{\chi}^2$, [d] *S-LEM*.

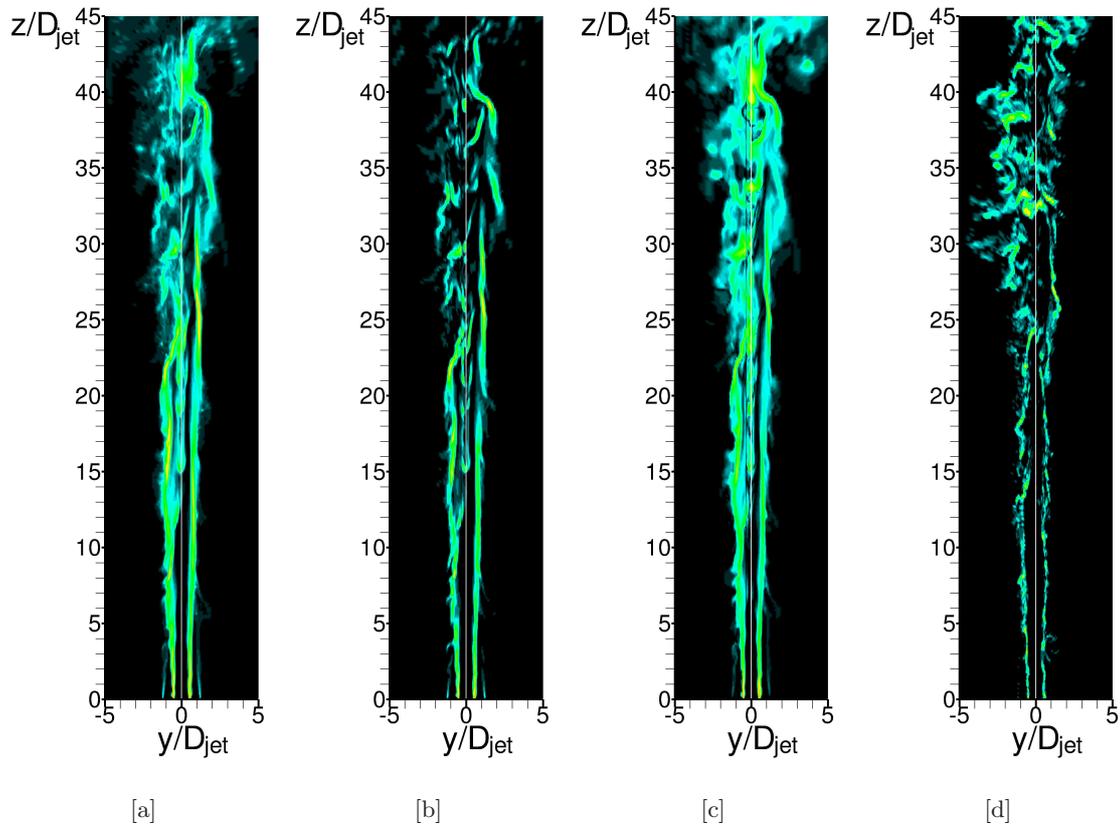


Fig. 9.2: Llama D; *LES*, *flamelets* y *S-LEM* no reactivo. Distribución instantánea de la disipación para los cuatro modelos. [a] hipótesis de equilibrio local, [b] ecuación para ξ_v^2 , [c] ecuación para ξ^2 , [d] *S-LEM*.

Gauss de las *PDFs* numéricas muestran mayor dispersión que las experimentales en algunos casos, principalmente en la estación más cercana a la boquilla y para la llama C. Al igual que en las mediciones, hay un sesgo hacia los valores más pequeños de la disipación, aunque es más evidente en las simulaciones. Sin embargo, el acuerdo con los datos experimentales puede considerarse bueno, sobre todo en el caso de la llama E, y comparable al obtenido con predicciones *LES* publicadas³.

9.2. Simulación con *flamelets* y *S-LEM* reactivo

9.2.1. Distribución submalla de especies químicas

En la Figuras 9.5 a 9.7 se muestran *scatter plots* para las tres llamas de las concentraciones submalla de las especies químicas involucradas en el mecanismo cinético empleado en *S-LEM* reactivo; también se presentan las correspondientes dispersiones experimentales, ambos conjuntos en espacio de ξ . En general, la estructura submalla de los escalares se corresponde con la observada en las mediciones, tanto en magnitud como en forma.

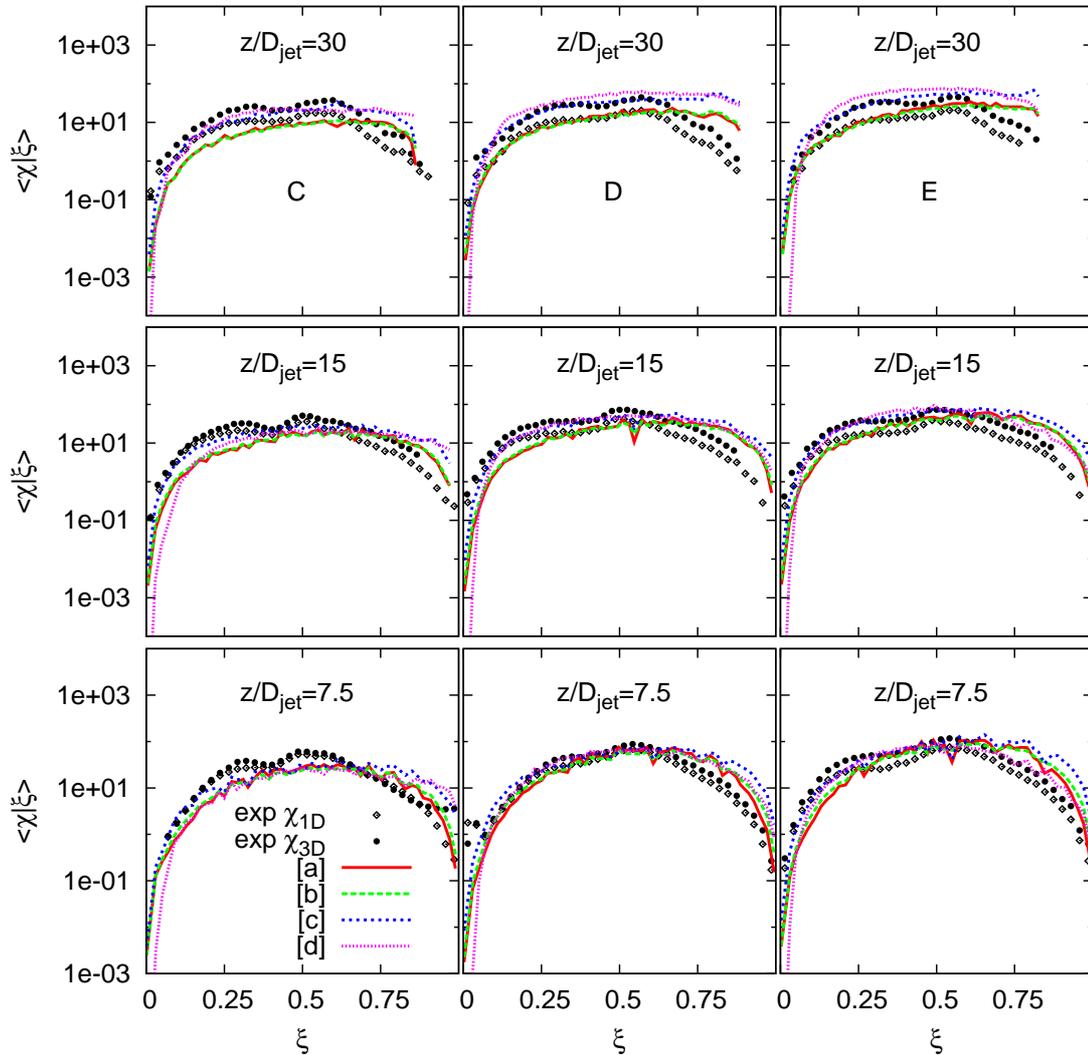


Fig. 9.3: Llama D; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Perfiles radiales de las medias temporales de la tasa de disipación promediadas de forma condicionada a los valores de la fracción de mezcla filtrada en tres posiciones axiales. [a] hipótesis de equilibrio local, [b] ecuación para ξ_v^2 , [c] ecuación para ξ^2 , [d] *S-LEM*.

9.2.2. Distribución submalla de la tasa de disipación

En la Figura 9.8 se muestra la estructura de la tasa de disipación de ξ extraída de los elementos del subdominio unidimensional. Al igual que en casos anteriores, la variable se promedia de forma condicionada con los valores de la fracción de mezcla. Hay una buena concordancia de la distribución numérica con los experimentos. La forma y la tendencia se mantiene de manera global en todos los casos, aunque el efecto de "valle" en torno al valor estequiométrico ξ_{st} tampoco logra ser reproducido. Por otro lado, en la tasa de disipación del combustible (χ_{fuel}) se aprecia la influencia de la zona estequiométrica (Figura 9.9). El perfil de su valor promediado de forma condicionada,

³Con *CMC* para la llama D en [166] y con un modelo lagrangiano de flamelets transitorios para la D y E en [98]

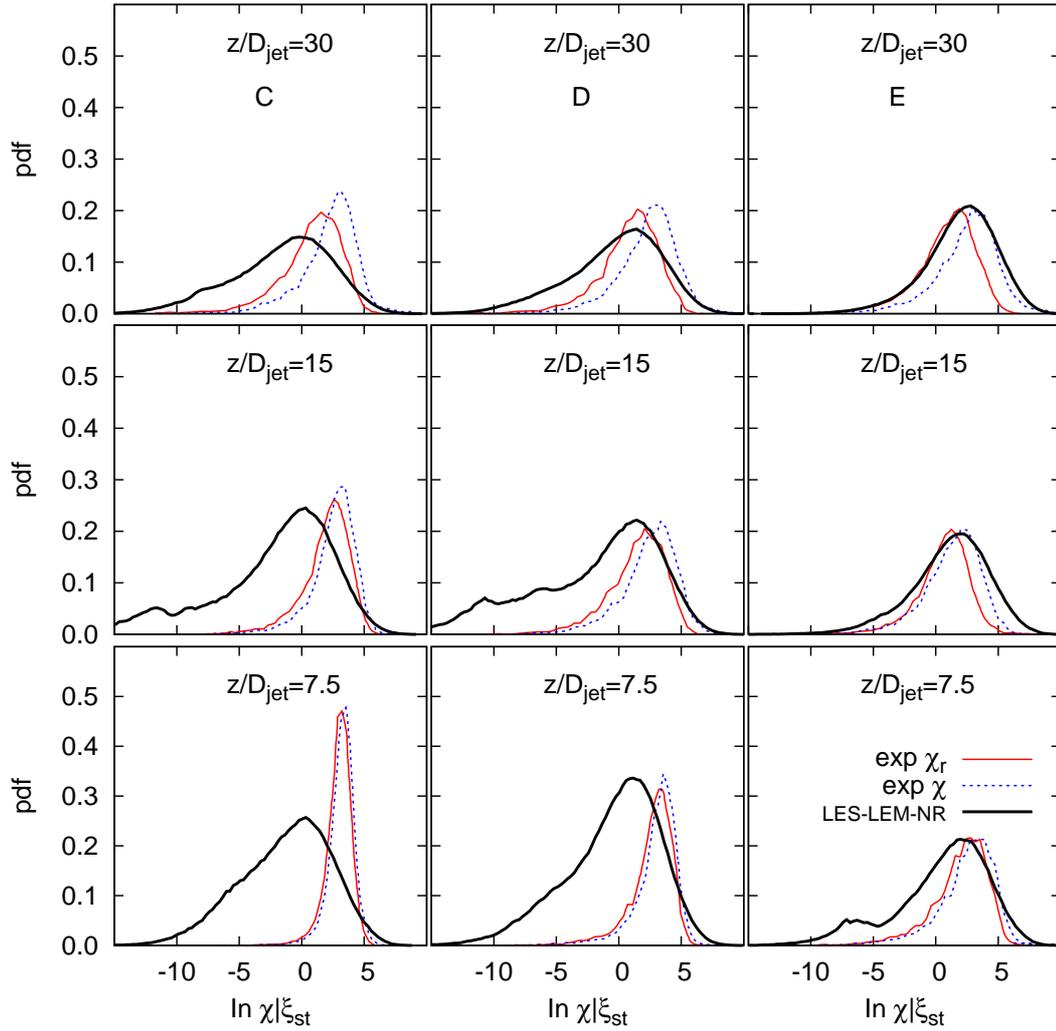


Fig. 9.4: Llamas C, D y E; *LES*, flamelets y *S-LEM* no reactivo. Funciones de densidad de probabilidad (PDFs) de la tasa de disipación condicionadas al valor de la fracción de mezcla estequiométrica.

$\chi_{fuel}|\xi$, modifica su comportamiento respecto a $\chi|\xi$, entre valores de 0.25 y 0.60 de la fracción de mezcla, por la reacción química que tiene lugar en torno al valor estequiométrico de ξ . La zona altamente reactiva estaría comprendida en este rango de valores.

Al igual que en el modelado con *S-LEM* no reactivo, las *PDFs* de la tasa de disipación de ξ se muestran en la Figura 9.10 para estas simulaciones. Los detalles para su construcción son similares que en el caso anteriormente mostrado: los valores se promedian de forma condicionada en torno al valor de $\xi_{st}=0.351$. El comportamiento observado es análogo que en el caso del modelado con flamelets y *S-LEM* no reactivo. Las campanas gaussianas de las *PDFs* numéricas resultan similares, más amplias que las experimentales en algunos casos y sesgadas hacia los valores más pequeños de la disipación. Las mayores discrepancias se manifiestan en la llama C mientras que en la E hay un buen acuerdo con los experimentos.

9.2.3. Interacción química-turbulencia

Una de las principales ventajas de determinar el transporte de escalares y la combustión con *S-LEM* es el evitar tener que recurrir al modelado del término fuente de generación o destrucción por reacción química, suponiendo hipótesis sobre el acoplamiento entre los fenómenos de turbulencia y reacción química. Esto se consigue al tener un dominio submalla capaz de resolver las escalas más pequeñas del flujo. Asimismo, esta característica permite que puedan evaluarse, al nivel de estas escalas, los efectos de la tasa de disipación en la estructura de la llama turbulenta y en el progreso de la reacción al acceder a valores de esta variable en cada elemento del dominio submalla. La dispersión de valores submalla de los escalares químicos (Figuras 9.5 a 9.7) indica claramente el acoplamiento complejo entre la turbulencia y la química en el flujo. En esta sección se analiza el efecto de estas interacciones.

En analogía con el tratamiento dado a los datos experimentales [106], se recurre a la teoría clásica que describe una llama turbulenta como una colección de laminas asintóticamente delgadas, flamelets laminares, alteradas por el flujo (ver Sección 4.5). En el dominio submalla unidimensional, cada elemento posee un valor local (Y_α, ξ, χ) que puede ser considerado como parte de un flamelet doblemente condicionado, con ξ y χ [185, 106]. De acuerdo a lo anterior, los valores generados en el dominio submalla pueden tratarse numéricamente para aplicar este concepto. Para obtener los valores medios doblemente condicionados, acorde con la práctica habitual en flamelets, se ha seleccionado la condición estequiométrica $\xi_{st}=0.351$ para el primer condicionado, mientras que para el segundo, se seleccionan los valores en las tasas de disipación más próximas a esta condición, χ_{st} , en todo el segmento radial del flujo en las tres estaciones donde se ha monitorizado la disipación. La Figura 9.11 presenta los resultados de las especies químicas medias doblemente condicionadas en el punto estequiométrico que están involucradas en el mecanismo químico empleado. El comportamiento mostrado es acorde con la teoría: a altos valores de χ_{st} aparecen cambios en la estructura de los flamelets. Conforme χ_{st} se incrementa, el tiempo total de mezclado (χ_{st}^{-1}) disminuye. Esto se traduce en una reducción local del número de Damköler que produce la disminución de las especies producidas por la combustión $\langle CO_2 | \xi_{st}, \chi_{st} \rangle$ y $\langle H_2O | \xi_{st}, \chi_{st} \rangle$. El correspondiente efecto se produce de manera inversa en las especies reactivas $\langle CH_4 | \xi_{st}, \chi_{st} \rangle$ y $\langle O_2 | \xi_{st}, \chi_{st} \rangle$ que experimentan un incremento a altos valores de χ_{st} ; todo ello en torno a la condición estequiométrica. Este comportamiento demuestra que las interacciones entre la turbulencia del flujo y la reacción química son capturadas en el dominio submalla de *S-LEM*. Aún cuando la reacción de combustión es representada mediante un mecanismo simple de un paso, éste ha mostrado un buen comportamiento en las predicciones.

9.3. Conclusiones

En este capítulo se ha analizado la estructura y propiedades del campo submalla unidimensional de *S-LEM*. Propiedades como la varianza y la tasa de disipación se han comparado con las provenientes del modelado en *LES* usando diferentes estrategias. La disponibilidad de mediciones experimentales para la tasa de disipación ha motivado que la mayor parte del análisis se centre en esta magnitud. La estructura de la distribución de χ determinada por los cálculos numéricos es comparada con la experimental. Al nivel submalla, se ha mostrado las cualidades del modelo *S-LEM* para reproducir adecuadamente el campo de especies químicas y el efecto que tiene la tasa

de disipación local en el cálculo de las especies químicas. De ello se puede concluir que los procesos del modelo *S-LEM* son capaces de reproducir adecuadamente los fenómenos que ocurren en el campo submalla de escalares, capturando los gradientes involucrados en la magnitud de la tasa de disipación y las complejidades de la interacción entre la reacción de combustión y la turbulencia. La cinética química de un paso ha sido mostrado un buen comportamiento en las predicciones.

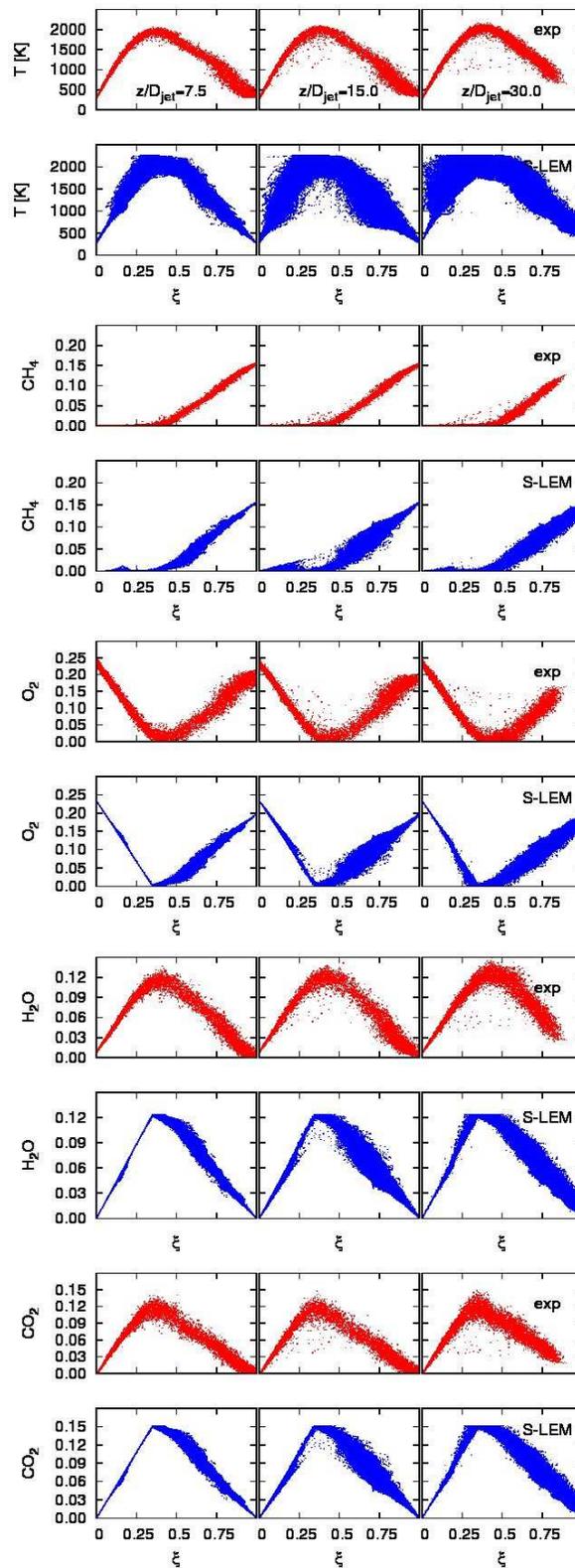


Fig. 9.5: Llama C; *LES* y *S-LEM* reactivo. Dispersión de los escalares químicos, experimentales y en el dominio submalla, en tres posiciones axiales.

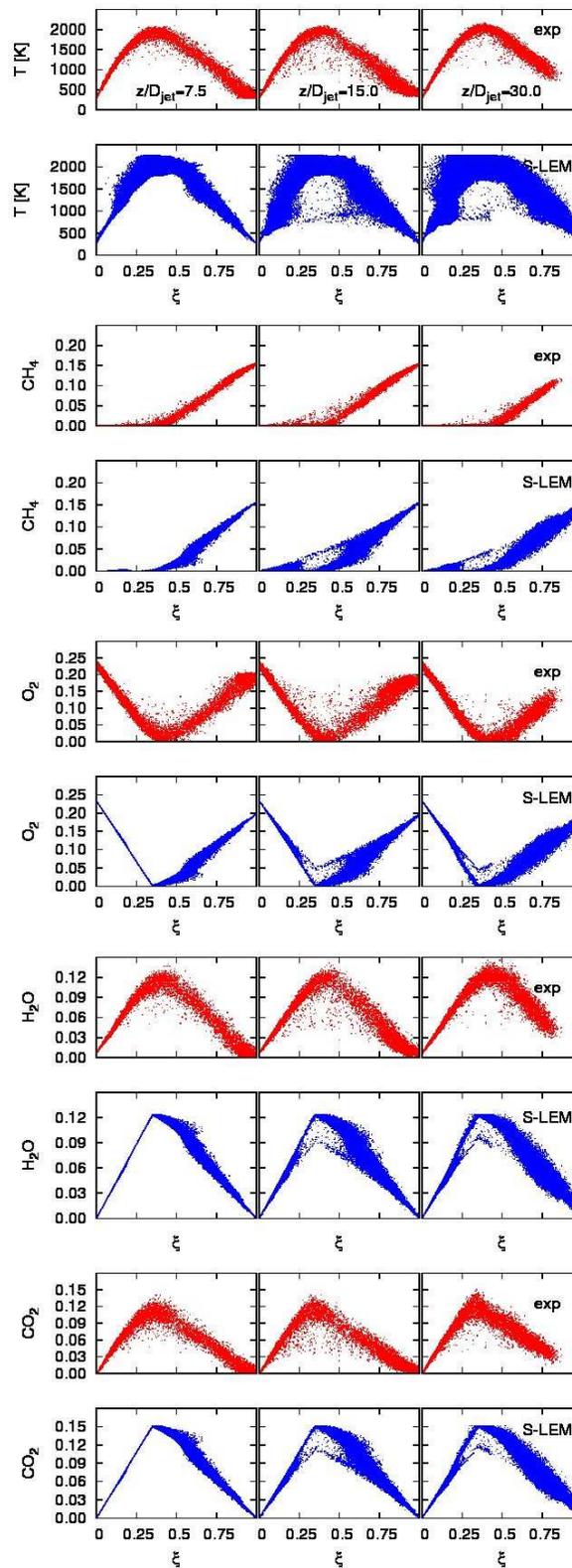


Fig. 9.6: Llama D; *LES* y *S-LEM* reactivo. Dispersión de escalares químicos, experimentales y en el dominio submalla, en tres posiciones axiales.

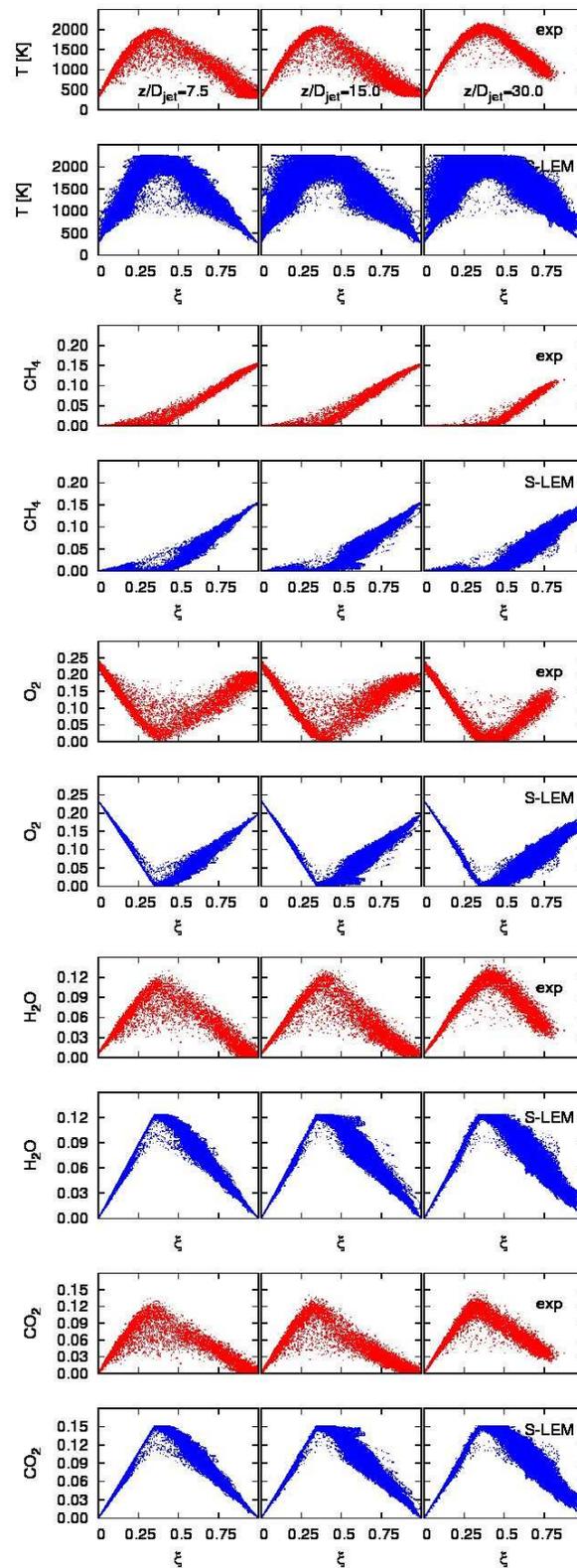


Fig. 9.7: Llama E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Dispersión de escalares químicos, experimentales y en el dominio submalla, en tres posiciones axiales.

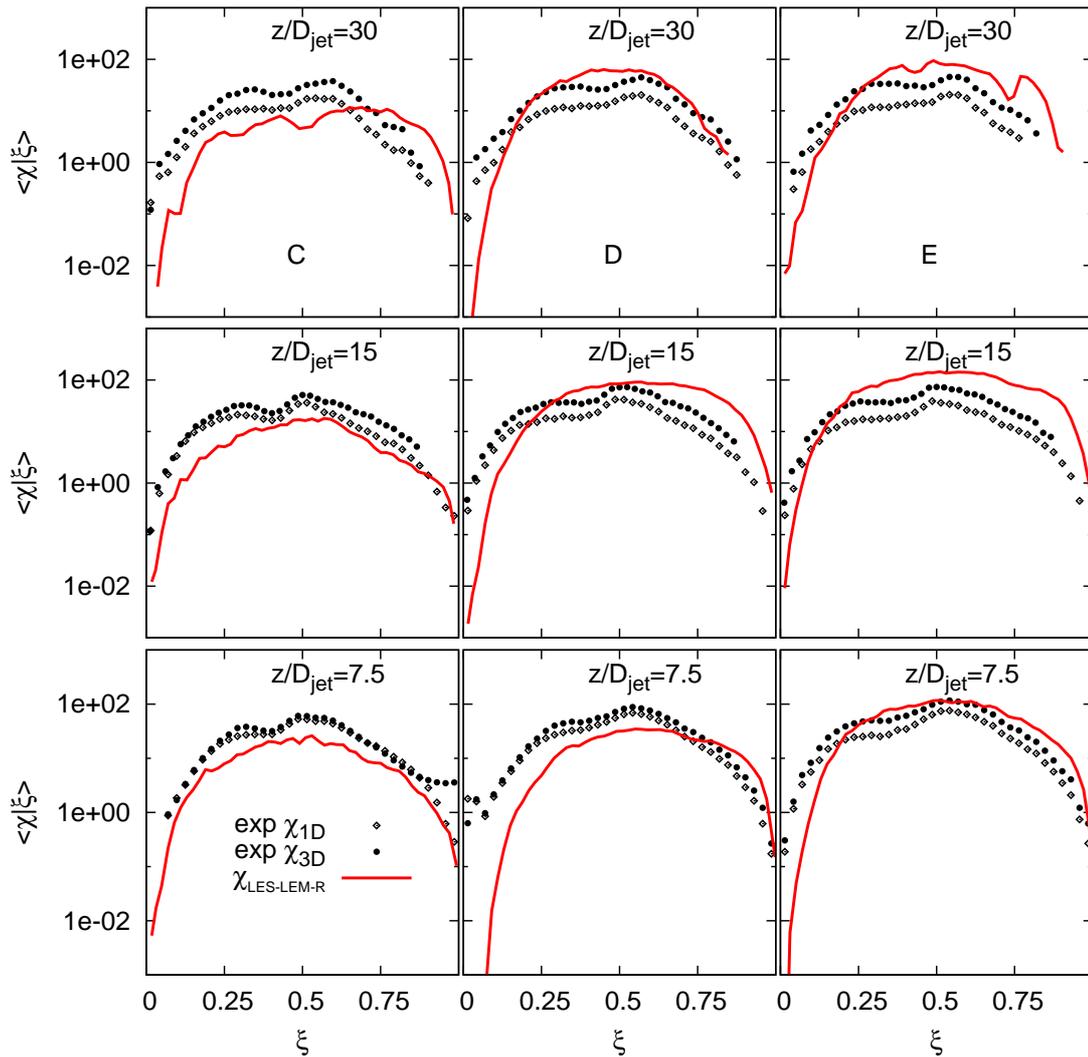


Fig. 9.8: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Perfiles radiales de la tasa de disipación promediada de forma condicionada a los valores de la fracción de mezcla en tres posiciones axiales. Los valores numéricos de ξ y χ han sido extraídos del dominio submalla de *S-LEM*.

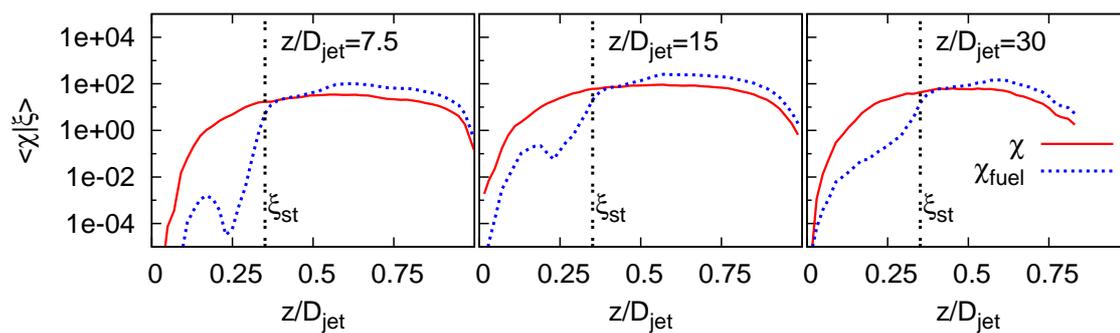


Fig. 9.9: Llama D; *LES*, flamelets y *S-LEM* reactivo. Perfiles radiales de la tasa de disipación promediada de forma condicionada a los valores de ξ , para la fracción de mezcla y el combustible, en tres posiciones axiales. La línea vertical discontinua localiza el valor estequiométrico de la fracción de mezcla.

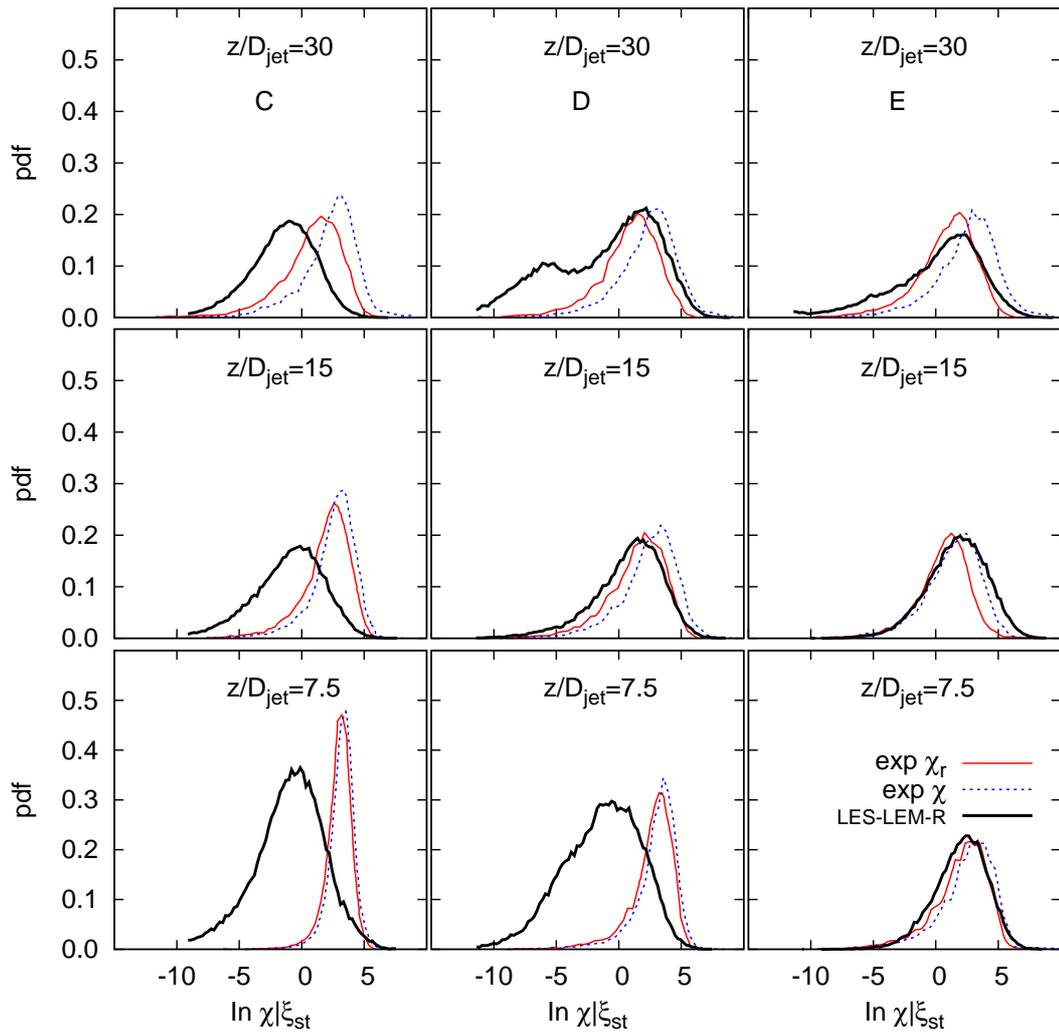


Fig. 9.10: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Funciones de densidad de probabilidad (PDFs) de la tasa de disipación condicionadas al valor de la fracción de mezcla estequiométrica.

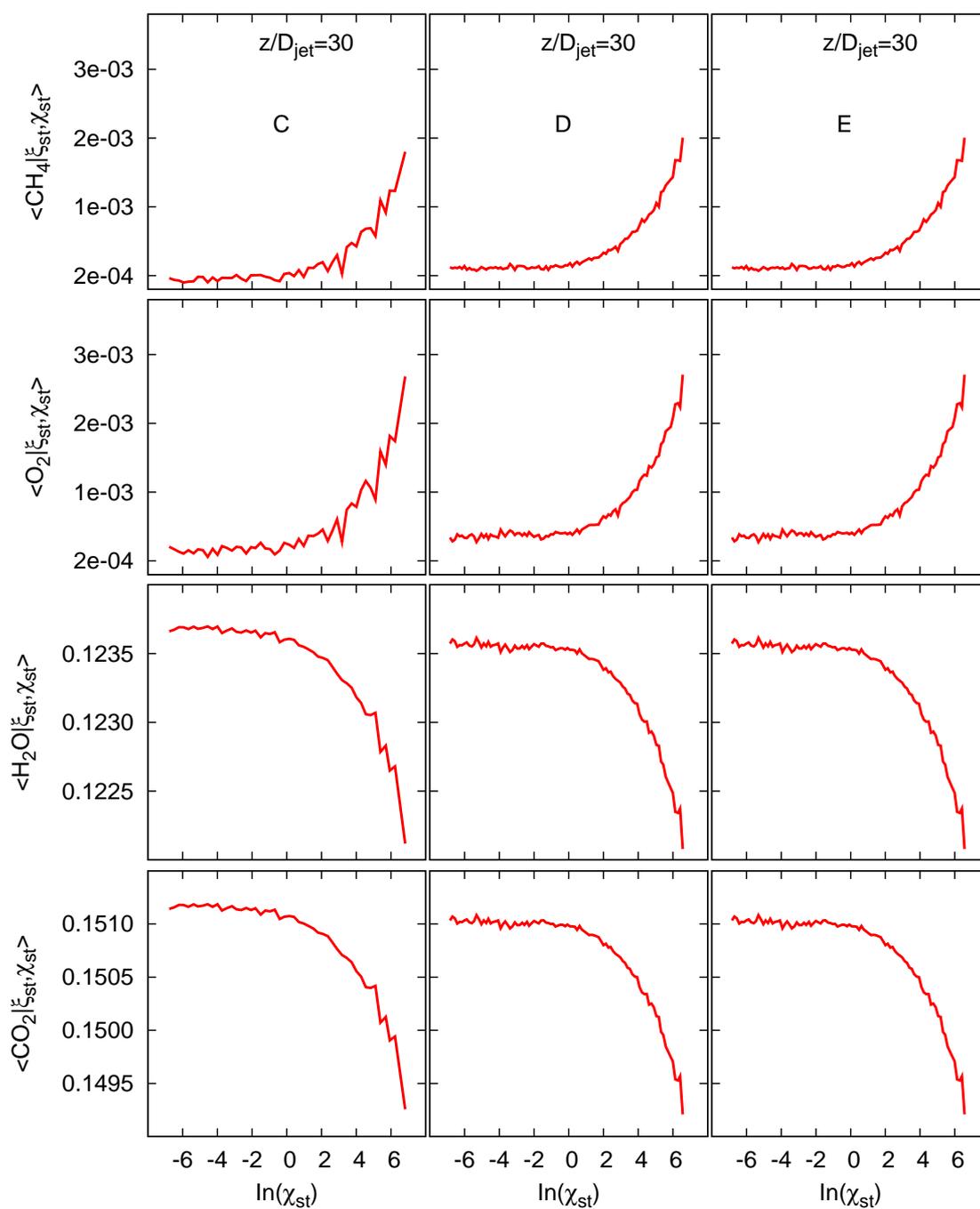


Fig. 9.11: Llamas C, D y E; *LES* y *S-LEM* reactivo. Especies químicas doblemente condicionadas en el punto estequiométrico con ξ_{st} y χ_{st} .

Capítulo 10

Conclusiones generales

En este trabajo se ha analizado numéricamente el flujo turbulento y reactivo presente en llamas turbulentas clasificadas como sistemas no premezclados. Mediante la Simulación de las Grandes Escalas, las ecuaciones de transporte filtradas que describen la dinámica del flujo han sido resueltas mediante el método de volúmenes finitos. Para el modelado de la combustión y sus interacciones con la turbulencia se han usado dos estrategias, un modelo de flamelets y *Linear Eddy Model*. Este último modelo ha sido empleado en dos modalidades; primero, para determinar la evolución de la fracción de mezcla y evaluarla con su contraparte en *LES* y, posteriormente, como modelo de combustión.

En los capítulos de la memoria y en la discusión de los resultados se han ido señalado algunas conclusiones particulares. En este apartado se han recopilado las más relevantes a modo de conclusiones generales y se sugieren líneas de investigación para el futuro.

10.1. Configuraciones y modelos

Llamas analizadas

Las configuraciones analizadas han sido las llamas C, D y E, de los laboratorios Sandia [173], para las cuales existen mediciones experimentales detalladas del campo de velocidad, escalares químicos y tasa de disipación. El combustible es una mezcla, en volumen, de 25 % de metano y 75 % de aire. Son sistemas no premezclados donde una corriente piloto estabiliza la llama y la mantiene anclada al quemador. La geometría es la misma en los tres casos; sin embargo, la velocidad de las corrientes del combustible y piloto se va incrementando, por lo que presentan diferente número de Reynolds y probabilidad de extinción local, siendo la llama E la que manifiesta una mayor intensidad en la turbulencia. Algunas de estas características las han hecho adecuadas para la validación del modelado numérico.

Malla computacional

Las ecuaciones que gobiernan el flujo turbulento y reactivo se han resuelto por medio de la técnica de la simulación de las grandes escalas, *LES*. El dominio ha sido discretizado con una malla cilíndrico-polar de $360 \times 60 \times 32$ celdas (axial, radial, acimutal) con una longitud axial de $45D_{jet}$ y un diámetro de $20D_{jet}$. La evaluación de la malla determinando el “índice de calidad en *LES*” [202, 203] permite concluir que la resolución ha sido la adecuada para las tres configuraciones analizadas. Aunque existen zonas donde el modelado supera el 20 %, éstas son puntuales; el índice muestra un valor inferior en la mayoría del dominio, incluso en la configuración E con número de Reynolds más alto. Este índice depende del valor local de la intensidad de la turbulencia en cada instante de tiempo; por tanto, considerando las complicaciones numéricas de introducir un algoritmo para el refinamiento local de la malla, el valor puede considerarse satisfactorio.

Modelos submalla en *LES*

En el desarrollo de la investigación se evaluaron los siguientes modelos para el cierre por turbulencia de los esfuerzos submalla:

- Smagorinsky,
 - convencional,
 - Lilly,
 - RNG.
- Modelo de una ecuación para la energía cinética turbulenta.
- Modelo WALE.

Comparado con los experimentos, el modelo de Smagorinsky convencional, su variante Lilly y el modelo de una ecuación, han mostrado una mejor predicción para la velocidad axial media y sus fluctuaciones que la variante RNG y el modelo WALE. La predicción de la fracción de mezcla con el modelo de una ecuación es ligeramente superior que el resto.

Una comparación de los niveles de energía cinética turbulenta que predicen los modelos permite observar que aunque en general el nivel total de energía es similar para todos los casos, el modelo de una ecuación es el que mejor reproduce el comportamiento en la componente submalla.

Condiciones de contorno para la turbulencia

La correcta definición de las condiciones de contorno en la entrada del dominio ha mostrado ser crucial para el éxito de las simulaciones. Las estrategias evaluadas fueron:

1. extensión del dominio aguas arriba de la boquilla ($2, 4$ y $8 D_{jet}$) para que las estructuras de la turbulencia se generen por la evolución o desarrollo propio del flujo;
2. imposición de fluctuaciones aleatorias no correlacionadas espacialmente;
3. imposición de fluctuaciones correlacionadas espacialmente de manera que satisfagan una escala de longitud integral y un tensor de esfuerzos de Reynolds experimental.

El primer procedimiento sobrestima la intensidad de las fluctuaciones y la velocidad media al final de la boquilla, incluso con una longitud de desarrollo de $8D_{jet}$. Los procedimientos de imposición de fluctuaciones predicen adecuadamente los perfiles experimentales en esta zona; sin embargo, las fluctuaciones correlacionadas espacialmente han mostrado los mejores resultados en la predicción de la dinámica del flujo aguas abajo de la boquilla.

Discretización del dominio submalla

En la discretización del dominio submalla de *S-LEM* se han empleado 108 elementos. El ratio entre la escala de filtrado Δ en *LES*, teóricamente la menor escala capturada por la malla, y η , la escala Kolmogorov, indica que para las tres llamas este número de elementos es apropiado. En zonas de alta turbulencia, donde para modelar el torbellino más pequeño se necesitaría un mínimo de seis elementos, podría haber una reducción en el tamaño mínimo de éstos (hasta del orden de 10η [239, 64]) sin afectar la difusividad del modelo, con lo que incluso en estos casos estarían cubiertas las necesidades de discretización.

Transporte de grandes escalas en *S-LEM*

En *S-LEM*, el transporte de las grandes escalas se modela a través del algoritmo denominado *splicing* [237]. En esta tesis se han incorporado contribuciones de alto orden haciendo una analogía con la técnica de la corrección diferida [168]. El procedimiento ha mostrado ser capaz de disminuir los errores asociados al orden en el transporte mejorando la predicción del escalar.

Proceso de solución y tiempo de cómputo

S-LEM en la modalidad no reactiva incrementa el tiempo de cómputo 2.33 veces con respecto a las simulaciones con flamelets, mientras que la modalidad reactiva lo incrementa en una proporción de 3.18 veces. Dadas las demandas computacionales de *S-LEM*, inicializar los campos a partir de los resultados de flamelets, restringir la dependencia del *CFL* sólo en dirección axial, la paralelización del cálculo y el uso de una capacidad informática sustancial ha permitido mantener los tiempos de cómputo en límites razonablemente moderados.

10.2. Simulaciones con flamelets y *S-LEM* no reactivo

Las configuraciones experimentales fueron primero simuladas mediante la combinación del proceso de solución de las ecuaciones de transporte en *LES* y la determinación del estado termoquímico del flujo mediante el modelo de flamelets. Con este modelo se separó el cálculo de la cinética química del flujo, determinando y tabulando *a priori* el estado termoquímico en función de la fracción de mezcla, su varianza y la tasa de disipación para posteriormente ser incorporado a través de una triple interpolación.

En general, las predicciones con *LES* y el modelo de flamelets muestran un buen acuerdo con los datos experimentales. Las simulaciones capturan adecuadamente el transporte turbulento del campo de velocidad y escalares. Las especies químicas mayoritarias coinciden en buen grado con los las experimentales. Por tanto, se puede concluir que el modelo de flamelets ha mostrado ser una opción válida para el modelado de la combustión en estas llamas, incluso en la configuración E con mayor probabilidad de extinción, aunque con ciertas reservas en la predicción de la fracción de mezcla en zonas de altos gradientes.

Este tipo de simulaciones han servido también para evaluar el transporte de un escalar no reactivo, la fracción de mezcla, mediante el modelo *S-LEM*. La comparación con su contraparte en *LES* y con los experimentos ha sido satisfactoria y permite corroborar el correcto modelado y acoplamiento de los procesos de transporte y mezclado submalla en *S-LEM*.

10.3. Simulaciones con *S-LEM* reactivo

Habiendo validado el transporte de un escalar no reactivo, *S-LEM* ha sido empleado para modelar, junto a los procesos propios de mezclado submalla y difusión molecular, la reacción de combustión y el consecuente estado termoquímico del flujo. A nivel de *LES* se ha prescindido de la ecuación de transporte para la fracción de mezcla. La evolución del campo de esta variable se ha determinado mediante *S-LEM*, junto con el transporte de dos escalares adicionales, la temperatura y la fracción másica del combustible.

Las predicciones efectuadas para las llamas experimentales muestran una buena captura de la dinámica del flujo turbulento. La comparación de estadísticas en distintas posiciones ha mostrado una buena correspondencia con los valores experimentales y mejorado en muchos casos los resultados obtenidos con flamelets, aun cuando en *S-LEM* la reacción química es determinada por un mecanismo global de un paso. Por otro lado, se observan algunas ligeras deficiencias, sobre todo en la última posición axial de análisis donde la turbulencia es más intensa. De manera global, el modelo ha determinado adecuadamente la posición de las zonas reactivas en el flujo y ha mostrado una correspondencia entre éstas y los perfiles de la temperatura y especies químicas. En el espacio de la fracción de mezcla, el comportamiento de los escalares termoquímicos concuerda razonablemente con las observaciones experimentales, con ligeras discrepancias en algunas estaciones para intervalos medios de ξ .

En general, se puede concluir que el modelado de las tres configuraciones mediante la combinación de *LES* y *S-LEM* en su modalidad reactiva ha sido satisfactorio.

10.4. Propiedades del campo submalla

Una de las características propias del modelo *S-LEM* es la posibilidad de obtener la distribución de escalares a nivel submalla y analizar su estructura. La existencia de mediciones experimentales para la tasa de disipación en las configuraciones analizadas motivó el análisis de esta estructura. Esta variable es gobernada por las escalas más pequeñas del flujo e influye directamente en el proceso de combustión. En este trabajo, la tasa de disipación es calculada en cada elemento del subdominio de *S-LEM*.

Análisis en simulaciones con flamelets y *S-LEM* no reactivo

Varianza y tasa de disipación determinadas a partir del campo filtrado

En un primer análisis, la varianza y la tasa de disipación medias obtenidas en las simulaciones con *S-LEM* no reactivo han sido comparadas con estrategias de modelado habituales en *LES*:

- deducción de una ecuación de transporte para la varianza submalla (ξ_v^2) [102];
- hipótesis de equilibrio local [22, 23, 88, 187];

- deducción de una ecuación de transporte para el segundo momento de la fracción de mezcla ($\tilde{\xi}^2$)[210].

En el caso de la varianza, los procedimientos han mostrado tendencias similares aunque magnitudes ligeramente diferentes. *S-LEM* ha mostrado valores cercanos a los del modelo de equilibrio local.

En la predicción de las tasas de disipación, los procedimientos han exhibido resultados muy próximos entre sí y con un patrón de distribución similar en el flujo.

La comparación en el espacio de la fracción de mezcla muestra una estructura muy próxima a la experimental para las tres llamas, aunque sin reproducir el efecto de “doble pico” en torno al valor estequiométrico de la fracción de mezcla que se aprecia en los experimentos.

Estructura submalla de la tasa de disipación

Las funciones de densidad de probabilidad para la tasa de disipación en torno al valor estequiométrico han mostrado la forma esperada y niveles próximos a las experimentales, aunque con un sesgo más pronunciado hacia los valores más pequeños en la disipación, sobre todo en el caso de la llama C que muestra una gaussiana más amplia en la estación más próxima a la boquilla.

Análisis en simulaciones con *S-LEM* reactivo

Estructura submalla de escalares químicos

La distribución submalla de los escalares químicos determinada con *S-LEM* en su modalidad reactiva ha mostrado una dispersión muy similar a la experimental. Este comportamiento indica que las interacciones entre la química y la turbulencia son capturadas en el dominio submalla.

Estructura submalla de la tasa de disipación

La distribución de la tasa de disipación media en función de la fracción de mezcla ha mostrado un buen acuerdo con la experimental en las tres llamas, aunque igualmente en este caso, en torno al valor ξ_{st} , no ha sido reproducido el efecto de “doble pico” observado en los experimentos. Por otra parte, en la tasa de disipación del combustible se ha apreciado claramente la influencia de la zona reactiva en torno al punto estequiométrico, en el intervalo para ξ comprendido entre 0.25 y 0.60.

Las funciones de densidad de probabilidad muestran la forma adecuada, ligeramente más próximas a las experimentales que las observadas con flamelets, principalmente en la llama E, aunque igualmente sesgadas hacia los valores pequeños de χ principalmente en la llama C.

Interacciones entre la cinética química y la turbulencia

Finalmente, para evaluar el efecto de la tasa de disipación en la reacción de combustión (interacción química-turbulencia), se ha hecho una analogía con la hipótesis de flamelets, considerando cada elemento del dominio submalla como parte de un flamelet doblemente condicionado. Los valores en los subdominios correspondientes a los tres segmentos radiales donde se ha monitorizado la disipación han sido promediados de forma doblemente condicionada con los valores estequiométricos de la fracción de mezcla (ξ_{st}) y la tasa de disipación (χ_{st}). En los flamelets estequiométricos se ha podido apreciar claramente la influencia de tasa de disipación en la reacción química, afectando la producción o destrucción de las especies a altos valores de χ_{st} . Este comportamiento confirma

que el modelo ha capturado las interacciones entre la cinética y la turbulencia. Aún cuando la reacción de combustión es representada mediante un mecanismo simple de un paso, éste ha mostrado un buen comportamiento en las predicciones.

10.5. Trabajo futuro

El uso de Linear Eddy Model como un modelo submalla ha recibido poca atención en la comunidad especializada, aun cuando numerosos textos hacen referencia a él como una de las técnicas más sofisticadas para la simulación de la combustión turbulenta [100, 72, 198, 17, 268]. Esta circunstancia se ha debido principalmente al alto coste computacional del modelo. Sin embargo, el avance tecnológico en equipos informáticos ha hecho más accesible su empleo, como ha quedado demostrado en este trabajo. Esto abre un abanico de oportunidades de investigación en el futuro. En esta sección se sugieren líneas, algunas de ellas en marcha actualmente, para continuar con el trabajo hasta ahora realizado.

En cuanto a los algoritmos del modelo *S-LEM*, la técnica de la corrección diferida aplicada a las distribuciones submalla para elevar el orden en el transporte del proceso de *splicing* ha mostrado ser una pieza importante en la simulaciones de esta tesis. Sin embargo, no está del todo claro su papel en otras configuraciones analizadas. Este aspecto está siendo estudiado actualmente. Un análisis riguroso de los errores asociados a este proceso contribuiría a aclarar el papel de éstos en el modelado y posiblemente al desarrollo de mejores algoritmos.

En cuanto a la cinética química en *S-LEM*, el siguiente paso sería el uso de mecanismos que involucren un mayor número de especies. En la misma línea, el uso de técnicas de tabulación, ISAT [201] o redes neuronales [20, 36], que permitan optimizar computacionalmente este proceso, será una pieza importante.

En lo que respecta a configuraciones experimentales, sería recomendable modelar la llama F, la configuración con la probabilidad de extinción local más alta de la serie de llamas de Sandia [173], usando *S-LEM* como modelo de combustión para evaluar los niveles en la tasa de disipación principalmente en las zonas próximas a la extinción. Asimismo, resulta atractivo emplear esta técnica para análisis de configuraciones con patrones de flujo más complejos, como las llamas de *bluff-body* y con *swirl*.

Finalmente, dada la cantidad de información que puede aportar el modelo *Linear Eddy Model* sobre el campo submalla de escalares, resulta lógico pensar en introducir al conjunto de herramientas de análisis el modelado análogo para el campo de velocidad: *ODT (One-Dimensional Turbulence)*. El avance en técnicas de paralelización y equipos de cómputo jugará un papel determinante para hacer viables este tipo de cálculos.

Apéndice A

Esquemas de discretización espacial y temporal

En este apéndice se presentan los esquemas de discretización espacial del término convectivo y el esquema de integración temporal de la ecuación general de transporte (5.1) introducida en el Capítulo. 5. En este mismo capítulo se han establecido los requisitos de precisión y estabilidad para *LES* que hacen imprescindible el empleo de esquemas de discretización de alto orden. Este apéndice comienza con la descripción de los esquemas de discretización espacial, clasificados en esquemas lineales y no lineales, definiendo el orden y las características de los esquemas más comunes junto con empleados en este trabajo. Cuando los esquemas lineales son de alto orden presentan una buena precisión, pero al no estar acotados, pueden presentar oscilaciones numéricas que pueden complicar las simulaciones. Como alternativa esta el empleo de esquemas no lineales de alto orden, los cuales cumplen con algún criterio de acotación. Posteriormente, se describe el esquema de integración de tercer orden de Adam-Moulton, empleado en la discretización temporal, y su implementación al *solver* principal junto con el cálculo de Δt acorde a los criterios de precisión en *LES*.

Para un tratamiento más completo sobre los esquemas de discretización se puede recurrir a las referencias [182, 247, 41, 275, 276, 277].

A.1. Discretización espacial

En el cálculo de la ecuación discretizada (5.2) se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar, ϕ , en la cara de la celda. Estas variables habitualmente se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. Así, el cálculo de ϕ y ρ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

Para describir los detalles básicos de los esquemas empleados en esta tesis se usará el sistema

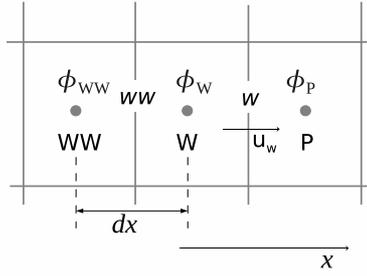


Fig. A.1: Diagrama esquemático de celdas para la discretización.

de celdas que se ilustra en la figura A.1. En el esquema, los valores en el nodo están representados con letras mayúsculas mientras que los valores en la cara con minúsculas. Como ilustración, se obtendrá el valor de ϕ en la cara w de la celda P. La velocidad en la cara w se considera como: $u_w > 0$.

Los esquemas de discretización pueden clasificarse en lineales y no lineales, y por el orden de precisión que proporcionan en la integración espacial del sistema [41].

Los esquemas de discretización pueden expresarse de forma general como [276, 277]:

$$\phi_w = \phi_W + \frac{1}{2}\psi(r) \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_{ww} \quad (\text{A.1})$$

Cuando se trata de una malla uniforme, la formula anterior se convierte en:

$$\phi_w = \phi_W + \frac{1}{2}\psi(r) \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_W - \phi_{WW}} \right) \quad (\text{A.2})$$

donde $\psi(r)$ es llamada función limitadora y es la que proporciona el orden en precisión al tiempo que puede cumplir algún criterio de acotación, y r es un ratio de gradientes, definido como:

$$r = \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_w \bigg/ \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_{ww} \quad (\text{A.3})$$

De igual manera, si la malla es uniforme:

$$r = \frac{(\phi_P - \phi_W)}{(\phi_W - \phi_{WW})} \quad (\text{A.4})$$

A.1.1. Esquemas lineales

Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable ϕ en la cara w es igual al del nodo adyacente aguas arriba [178], es decir, para $u_w > 0$:

$$\phi_w = \phi_W \quad (\text{A.5})$$

Por esta razón, también es conocido como esquema *upwind*. Esta alternativa es la que por usan por defecto la mayoría de los código de *CFD* ya que es sencilla, acotada y altamente estable

casi bajo cualquier situación. Sin embargo tiene los inconvenientes de su precisión, que es de primer orden y conlleva problemas asociados de difusión numérica. Esta falsa difusión puede causar problemas si en el flujo los procesos convectivos dominan sobre los difusivos o cuando hay cambios bruscos en la dirección del flujo, como por ejemplo en flujos con recirculación. El valor de la función limitadora en la Ecuación A.1 para este esquema es

$$\psi(r) = 0 \quad (\text{A.6})$$

En todo caso, este esquema no cumple el criterio de precisión en *LES* y generalmente no es usado.

Diferencias centradas

Este esquema supone una variación lineal de ϕ entre los nodos W y P , por tanto el valor en la cara w es:

$$\phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \quad (\text{A.7})$$

Este esquema tiene una precisión de segundo orden y es habitualmente usado para *LES*. Sin embargo, tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet (ecuación 5.3, Cap. 5), al ser éste un parámetro comparativo entre los procesos de convección y difusión. En situaciones en las que los procesos convectivos dominan sobre los difusivos, (flujos con Re altos), donde $Pe > 2$, el esquema presenta oscilaciones numéricas y es necesario emplear estrategias que estabilicen el cálculo, como incrementar los factores de relajación. La función limitadora para este esquema es igual a

$$\psi(r) = r \quad (\text{A.8})$$

Esquema Híbrido

Este esquema consiste en evaluar mediante los esquemas de diferencias desplazadas y centradas el valor de la propiedad ϕ en la cara del volumen de control [249]. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

- Si $Pe \leq 2$, se usan diferencias centradas:

$$\phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \quad (\text{A.9})$$

- Si $Pe > 2$, se usan diferencias desplazadas:

$$\phi_w = \phi_W, \quad Pe > 2 \quad (\text{A.10})$$

Para flujos con bajo Re y $Pe < 2$ el esquema es de segundo orden y resulta preciso, pero presenta los problemas asociados al esquema de diferencias desplazadas cuando el flujo está dominado por los procesos de convección ($Pe > 2$).

En general, el uso de los esquemas lineales de alto orden no es recomendado en el cálculo de cantidades turbulentas que no aceptan valores negativos por el efecto de las oscilaciones; tampoco son adecuados en el tratamiento de la concentración de especies y de la entalpía para las cuales se prefiere tener la solución acotada.

A.1.2. Esquemas de alto orden no lineales

La mayoría de estos esquemas están diseñados para cumplir algún criterio de acotación mediante la función limitadora de la Ecuación A.1. Estos criterios son usualmente la condición de *Total-Variation Dimishing* (TVD) [256] o la condición de Positividad [247].

EL valor de las funciones limitadoras para los esquemas de alto orden no lineales empleados en esta tesis son:

- SMART (también llamado QUICK [128] acotado) [80]:

$$\psi(r) = \max \left[0, \min \left(2r, \frac{3}{4}r + \frac{1}{4}, 4 \right) \right] \quad (\text{A.11})$$

- Van Leer MUSCL [261]:

$$\psi(r) = \max \left[0, \min \left(2r, \frac{1}{2}r + \frac{1}{2}, 2 \right) \right] \quad (\text{A.12})$$

- Superbee [218]:

$$\psi(r) = \max [0, \min (2r, 1), \min (r, 2)] \quad (\text{A.13})$$

- CHARM [294]:

$$\begin{aligned} \psi(r) &= \frac{r(3r+1)}{(r+1)^2} \quad \text{para } r > 0 \\ \psi(r) &= 0 \quad \text{para } r \leq 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

- Minmod [219]:

$$\psi(r) = \max [0, \min (r, 1)] \quad (\text{A.15})$$

La introducción de un esquema de alto orden se suele hacer mediante la técnica de corrección diferida [168] [275], que expresa el valor de la variable ϕ en la cara e como:

$$\phi_w = \phi_w^{upwind} + \phi'_w \quad (\text{A.16})$$

donde ϕ_e^{upwind} es el valor en la cara calculado con el esquema de diferencias desplazadas de primer orden ($\phi_w^{upwind} = \phi_W$ según la figura A.1) y ϕ'_w es el término de corrección de alto orden expresado de acuerdo con la ecuación A.1 como:

$$\phi_w = \frac{1}{2} \psi(r) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{ww} \quad (\text{A.17})$$

El valor de corrección, ϕ'_w , se incluye como término fuente en la ecuación discretizada (Ecuación 5.2, Cap. 5).

A.2. Discretización temporal

A.2.1. Esquema de alto orden en el tiempo

En el Capítulo 5 se ha mencionado la necesidad de integración de alto orden en el tiempo acorde a los criterios de precisión para *LES*. En las simulaciones de esta tesis se ha empleado el esquema de tipo implícito de tercer orden de Adam-Moulton [182]. De acuerdo a este esquema, el valor de una variable ϕ en cada uno de los nodos se determina con la siguiente expresión:

$$\phi^n = \phi^{n-1} + \frac{\Delta t}{12} [5f(t_n, \phi^n) + 8f(t_{n-1}, \phi^{n-1}) - f(t_{n-2}, \phi^{n-2})] \quad (\text{A.18})$$

donde n es el paso temporal actual durante la ejecución de una simulación y $(n-1)$ y $(n-2)$ son uno y dos pasos temporales anteriores respectivamente durante la ejecución del problema. La función $f(t, \phi)$ representa todos los miembros de la ecuación de transporte de ϕ , a excepción del término temporal, en un determinado paso dt .

Este esquema ha sido implementado transformando algebraicamente la Ecuación A.18 en la A.19. De este modo, es posible incorporar los nuevos términos como fuentes extra en la ecuación de transporte.

$$\frac{\phi^n - \phi^{n-1}}{\Delta t} = f(t_n, \phi^n) - \frac{7}{12}[f(t_n, \phi^n)] + \frac{2}{3}[f(t_{n-1}, \phi^{n-1})] - \frac{1}{12}[f(t_{n-2}, \phi^{n-2})] \quad (\text{A.19})$$

A.2.2. Cálculo del paso temporal (Δt)

Aunque el esquema de integración temporal empleado es implícito, dado el criterio de precisión en *LES*, se ha implementado al solver principal una subrutina que determina el valor del paso temporal dt de acuerdo al cálculo del tiempo característico de cada una de las celdas, es decir, el tiempo que tardaría una partícula en recorrer completamente una celda a la velocidad del fluido en esa misma celda. Matemáticamente, esto se expresa mediante la condición de Courant:

$$\Delta t^{CFL} = \min\left[\left(\frac{\Delta x}{u}\right), \left(\frac{\Delta x}{v}\right), \left(\frac{\Delta z}{w}\right)\right] \quad (\text{A.20})$$

Este cálculo se efectúa en cada nodo al final de las iteraciones del paso temporal y el valor de dt que se usa en el siguiente paso es el mínimo calculado en todo el dominio (o una fracción de éste). Mediante este cálculo se asegura la captura por parte de la malla de las escalas temporales del movimiento asociadas con el tamaño de las celdas, conservando así, una relación entre el valor del paso temporal dt y la malla.

Apéndice B

Transporte de términos de gran escala en *S-LEM*

El modelo *S-LEM* es una adaptación de la formulación original del modelo *LEM* de Kerstein [112, 113, 115, 114, 116] para su empleo como modelo submalla en *LES*. En el método, descrito en los Apartados 4.7 y 5.7, las escalas del movimiento y transporte del flujo son separadas de manera similar a *LES*: en grandes escalas que deben ser capturadas por la malla y en escalas submalla resueltas mediante un dominio unidimensional inmerso en cada celda, donde se tratan simultáneamente, aunque de forma independiente, los procesos de difusión molecular y mezclado turbulento. El transporte de las grandes escalas se realiza mediante el procedimiento llamado *splicing*, que consiste en el intercambio entre celdas, de acuerdo con los gastos máxicos que atraviesan las caras de éstas, de porciones o segmentos de los subdominios unidimensionales. A pesar de ser un fenómeno gobernado por las grandes escalas, los procesos submalla influyen en éste al modificar la forma de las distribuciones que son transportadas. En este apéndice se presenta un análisis de la sensibilidad del *splicing* a parámetros tales como el número de elementos de discretización del subdominio y las constantes que afectan el mezclado submalla. Para el análisis se han usando configuraciones simples. Finalmente, se propone la incorporación al método de términos de corrección para elevar el orden de precisión del transporte.

B.1. Influencia de parámetros submalla sobre el *splicing*

En este apartado se analiza la influencia del número de elementos de discretización del dominio unidimensional y de los procesos de mezcla submalla sobre la convección de las grandes escalas determinada por el algoritmo de *splicing*.

El caso *test* consiste en una malla cartesiana uniforme de 4 x 5 x 30 celdas y de 40 x 50 x 300 cm en x , y y z respectivamente. Por un extremo entra un fluido a una velocidad de 10cm/s. El flujo evoluciona mientras se monitoriza la convección del escalar.

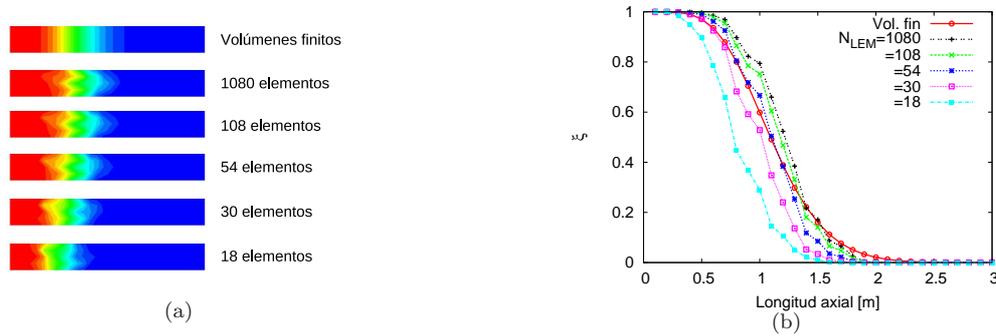


Fig. B.1: Convección unidimensional de un escalar usando distintos números de elementos en el subdominio de *S-LEM*

B.1.1. Discretización submalla

En la Figura B.1 se comparan los resultados de la convección del escalar usando distintos números de elementos¹ en el dominio submalla con el contorno determinado por volúmenes finitos. En general, a medida que disminuye el número de elementos, el frente del flujo se retrasa. Sin embargo, las diferencias son inapreciables entre el uso de 108 y 1080 elementos. La localización del frente del escalar para estos casos se ha determinado correctamente con respecto al transporte en volúmenes finitos, aunque muestra un aspecto irregular. Este comportamiento se debe al carácter estocástico del transporte (ver Capítulo 5, Sección 5.7.1); los elementos transportados son aleatoriamente seleccionados y la distribución submalla, por tanto, es diferente de una celda a otra. Como se verá en el siguiente apartado, si el mezclado submalla es lo suficientemente intenso, las distribuciones tienden a ser más uniformes y disminuye la irregularidad en el frente.

B.1.2. Procesos de mezcla submalla

En el modelo *S-LEM*, los procesos de mezcla submalla son la difusión y los torbellinos por *triplet maps*. El efecto del mezclado se ha analizado modificando los parámetros que afectan la distribución submalla del escalar. Tales parámetros son:

- N_η , parámetro que afecta el tamaño mínimo de un torbellino modelado mediante *triplet maps* al restringir el rango efectivo de torbellinos entre la escala de Kolmogorov y el tamaño del filtro como $\eta/\Delta = N_\eta Re^{-3/4}$
- C_λ , parámetro que afecta la frecuencia de eventos de *triplet maps* (ecuación 4.61)
- Sc , el número de Schmidt, que modifica la difusión molecular.

Puesto que N_η y C_λ sólo actúan si hay turbulencia submalla, para el análisis de estos parámetros se ha fijado una intensidad submalla para la turbulencia del 10% en todo el dominio. Los valores por omisión son: $N_\eta = 1$, $C_\lambda = 15$ y $Sc = 1$.

En la Figura B.2 se muestran los resultados de variar los parámetros citados. De manera general, se puede ver que el frente del escalar está en la misma posición para todos los contornos

¹Todos los valores usados son múltiplos de 6

(Figuras B.2(a), B.2(d) y B.2(g)) aunque la forma del frente varía ligeramente. La influencia de estos parámetros puede observarse a través del análisis de la media del escalar y su varianza en el eje central del dominio. Como era de esperar, el parámetro N_η no modifica sustancialmente el seguimiento del frente, aunque para valores de N_η de 5 y 10 el acuerdo con el transporte por volúmenes finitos es mejor (Figura B.2(b)). En el caso de la varianza (Figura B.2(c)), los valores están muy próximos entre sí, excepto en un punto para $C_\lambda = 5$.

En cuanto a C_λ , en las Figuras B.2(d) y B.2(e) se puede apreciar un ligero cambio en el frente del escalar con la variación de este parámetro. El mejor acuerdo se logra con $C_\lambda=1$, lo cual corrobora que el mezclado se ve incrementado por la mayor frecuencia de eventos de *triplet maps*. Este aumento en la intensidad del mezclado submalla se ve asimismo reflejado en una disminución de la varianza (Figura B.2(f)) para $C_\lambda=1$; sin embargo, un valor de $C_\lambda = 5$ no resulta tan drástico en su disminución.

En lo que respecta al mezclado o difusión molecular, el efecto es similar; a medida que se incrementa el coeficiente de difusión disminuyendo el número de Schmidt, el frente de llama es más uniforme, llegando incluso a ser prácticamente el mismo que el determinado mediante volúmenes finitos (Figuras B.2(g) y B.2(h)). Sin embargo, este comportamiento va acompañado de la correspondiente disminución en la varianza (Figura B.2(i)). Números de Schmidt de ordenes menores 0.1 no corresponden a los comúnmente empleados, al menos para escalares como la fracción de mezcla o gases como el CH_4 y aire; sin embargo, mediante este análisis se ha mostrado que el esquema conserva la media del escalar y que la distorsión en el frente convectivo del escalar es inherente al carácter estocástico del proceso de transporte o *splicing*.

B.2. Orden de precisión en el esquema de transporte en S-LEM

En esta sección se presentan los resultados del test realizado para la convección bidimensional del escalar. El dominio empleado consiste en una malla cartesiana uniforme de $4 \times 50 \times 50$ celdas con un tamaño de $40 \times 500 \times 500$ cm en x , y y z , respectivamente. A través de la malla hay un flujo de aire que recorre diagonalmente el dominio a una velocidad uniforme de 10 cm/s. Por una de las esquinas inferiores, se inyecta un flujo constante de fluido (CH_4) con diferente densidad. En la Figura B.3 se muestra un esquema de este caso test. La intensidad de la turbulencia submalla es del 10% para todo el dominio. El número de Schmidt se ha fijado igual a 0.7, $C_\lambda = 1$ y $N_\eta = 1$.

El objetivo de este test es analizar el orden de precisión en el transporte de los elementos de los dominios submalla comparando con contornos generados bajo las mismas condiciones con esquemas de volúmenes finitos.

En la Figura B.4 se muestran los contornos del escalar para el transporte por volúmenes finitos empleando un esquema *upwind* de primer orden de precisión (B.4(a)) y por S-LEM (B.4(b)). El flujo evoluciona para cada caso con la densidad determinada por la mezcla de los dos fluidos. Los contornos son similares; lo que confirma que el transporte de S-LEM tiene un orden equivalente al de un esquema tipo *upwind* de primer orden.

B.2.1. Adaptación de esquemas de alto orden a S-LEM

En esta tesis se propone una estrategia similar a la adoptada en los códigos de volúmenes finitos (ver apéndice A) para incrementar el orden de los términos convectivos.

En un código de volúmenes finitos, el transporte de un escalar ϕ mediante un esquema explícito

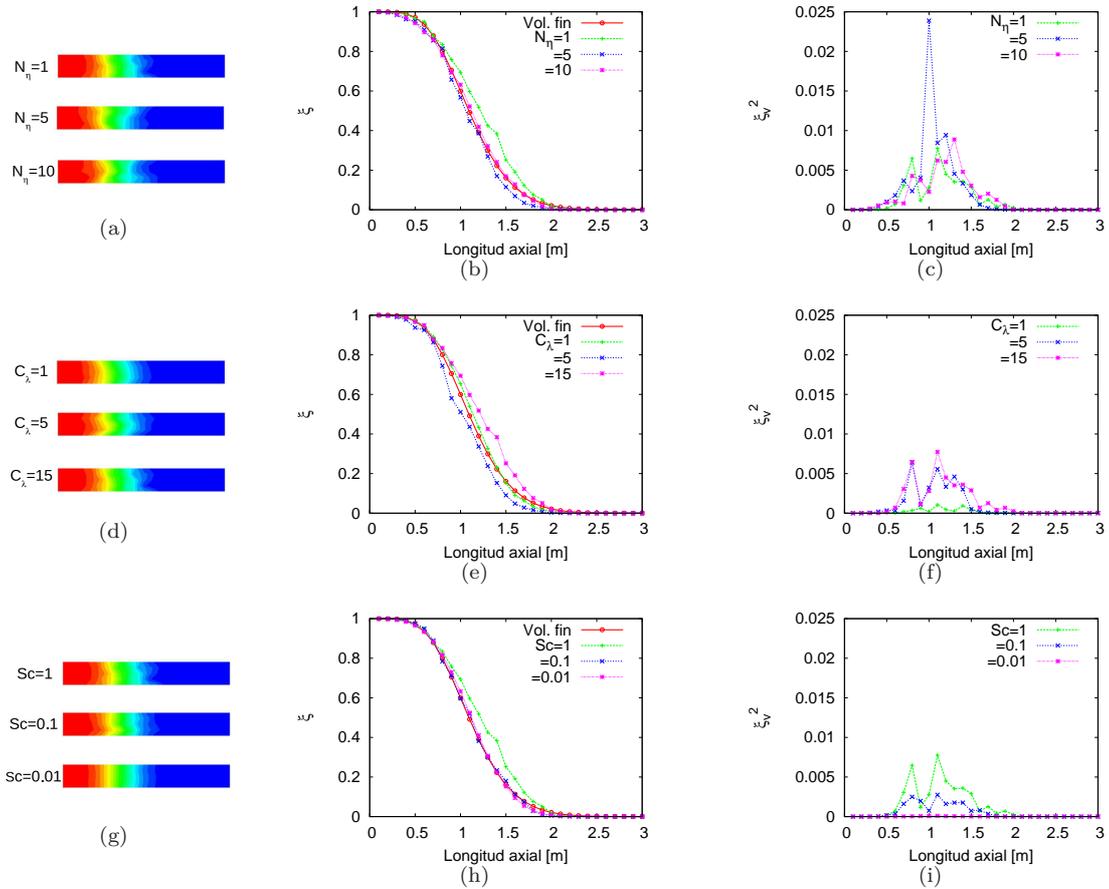


Fig. B.2: Convección unidimensional de un escalar para distintos valores de los parámetros de mezclado de N_η , C_λ y S_c

en el tiempo puede determinarse como [262]:

$$\phi_P^n = \frac{\sum_i^{e,w,s,n,l,h} [[a_i \phi_i]] + \left(a_T^0 - \sum_i^{e,w,s,n,l,h} [[a_i \phi_i]] \right) \phi_P^{n-1} + b_P}{a_T^0}, \quad (\text{B.1})$$

donde:

- e, w, s, n, l y h son los índices de las caras vecinas de la celda P ;
- $[[a_k \phi_k]]$ representa los flujos de ϕ que provienen de las celdas vecinas;
- $a_T^0 = \frac{m_P}{\Delta t}$, siendo m_P la masa de la celda P y Δt el tamaño del paso temporal, y
- b_P representa a los términos fuente.

La implementación de un esquema de alto orden en un código de volúmenes finitos se realiza habitualmente con la técnica de la corrección diferida (ver Apéndice A), agregando los términos que proporcionan un mayor orden como términos fuente de la ecuación de transporte. Siguiendo

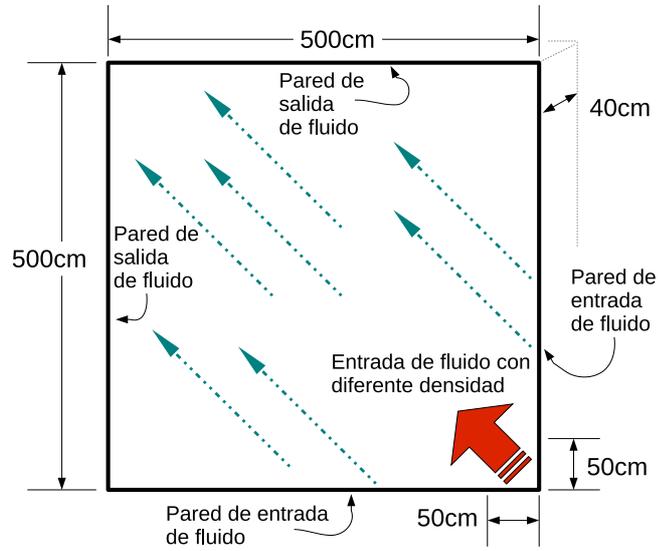
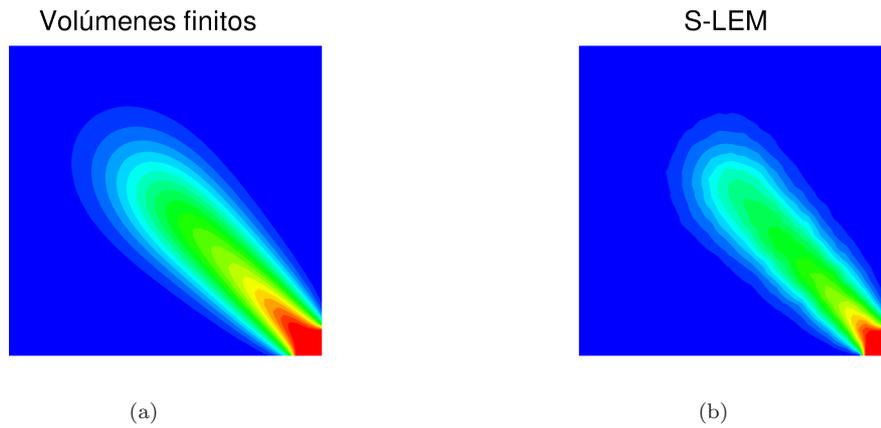


Fig. B.3: Esquema del caso test para la convección bidimensional


 Fig. B.4: Convección en 2D de un escalar en volúmenes finitos y *S-LEM*

la notación de la Figura B.5, el término de corrección en la celda P proviene del cálculo del valor de la variable ϕ en la cara w como [276, 277]:

$$\phi_w = \phi_W + 0,5\psi(r) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{ww}, \quad (\text{B.2})$$

donde el primer término del lado derecho representa la contribución de primer orden (esquema *upwind*) y el segundo la corrección que se incorporaría como término fuente. $\Psi(r)$ es una función limitadora que depende del ratio r de los gradientes de ϕ en las caras de las celdas y proporciona el orden de precisión a la corrección; su valor depende del esquema utilizado. r , de acuerdo con la

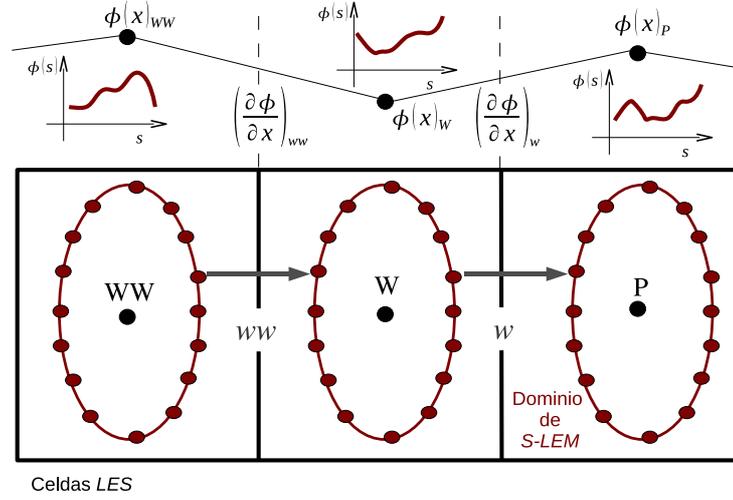


Fig. B.5: Notación esquemática para la implementación de esquemas de alto orden para la convección

notación de la Figura B.5, se calcula como:

$$r = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \bigg/ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{ww} . \quad (\text{B.3})$$

Para elevar el orden de precisión en el *splicing* se propone incorporar al método el segundo término de la ecuación B.2. En lugar de trabajar con el valor en un nodo o cara se emplea en este caso el valor de la distribución submalla de *S-LEM*. Esta corrección se introduce al esquema partiendo de la consideración de que la media de la distribución dada por el *splicing* es equivalente al valor del escalar transportado en volúmenes finitos. En este proceso, a diferencia del *splicing* donde la distribución final es producida por el desplazamiento entre celdas de segmentos del dominio submalla, los términos de corrección se calculan y agregan como fuentes elemento a elemento. Una técnica similar, transportando la distribución en la caras ponderadas con los flujos entrantes en las celdas, ya había sido usada anteriormente en [174]; sin embargo, este método tiene también una precisión de primer orden y el inconveniente de no conservar la varianza de la distribución. En este trabajo se propone que la distribución submalla final, con orden de precisión mayor a uno, se determine como la suma de la distribución generada después del intercambio de elementos entre celdas y los términos de corrección calculados elemento a elemento. Matemáticamente:

$$\phi_k^n |_{\text{alto-orden}} = \phi_k^n |_{\text{splicing}} + \frac{\sum_i^{e,w,s,n,l,h} a_i \left[0,5\psi(r) \left(\frac{\partial \phi^k}{\partial x} \right)_{ww} \right]}{\frac{m_P}{dt}} . \quad (\text{B.4})$$

Las expresiones para el cálculo de la función $\psi(r)$ pueden consultarse en el apéndice A.

En la figura B.6 se muestran los contornos del escalar introduciendo las correcciones de alto orden. En estas predicciones, los parámetros de mezclado turbulento, C_λ y N_η se han igualado a 1, mientras que el Sc es igual a 0.7. Con el fin de efectuar una comparación, se presentan también los

contornos con el esquema *upwind* para volúmenes finitos y su equivalente en *S-LEM*. Los esquemas implementados en *S-LEM* mejoran la predicción del contorno del escalar, siendo ligeramente más notable en los esquemas SMART (B.6(d)) y Superbee (B.6(e)). Sin embargo, son inferiores a la predicción de alto orden con SMART hecha en volúmenes finitos. Este comportamiento, por otro lado, es normal al tratarse en general de operaciones realizadas sobre distribuciones y no sobre un valor medio como en el caso de volúmenes finitos.

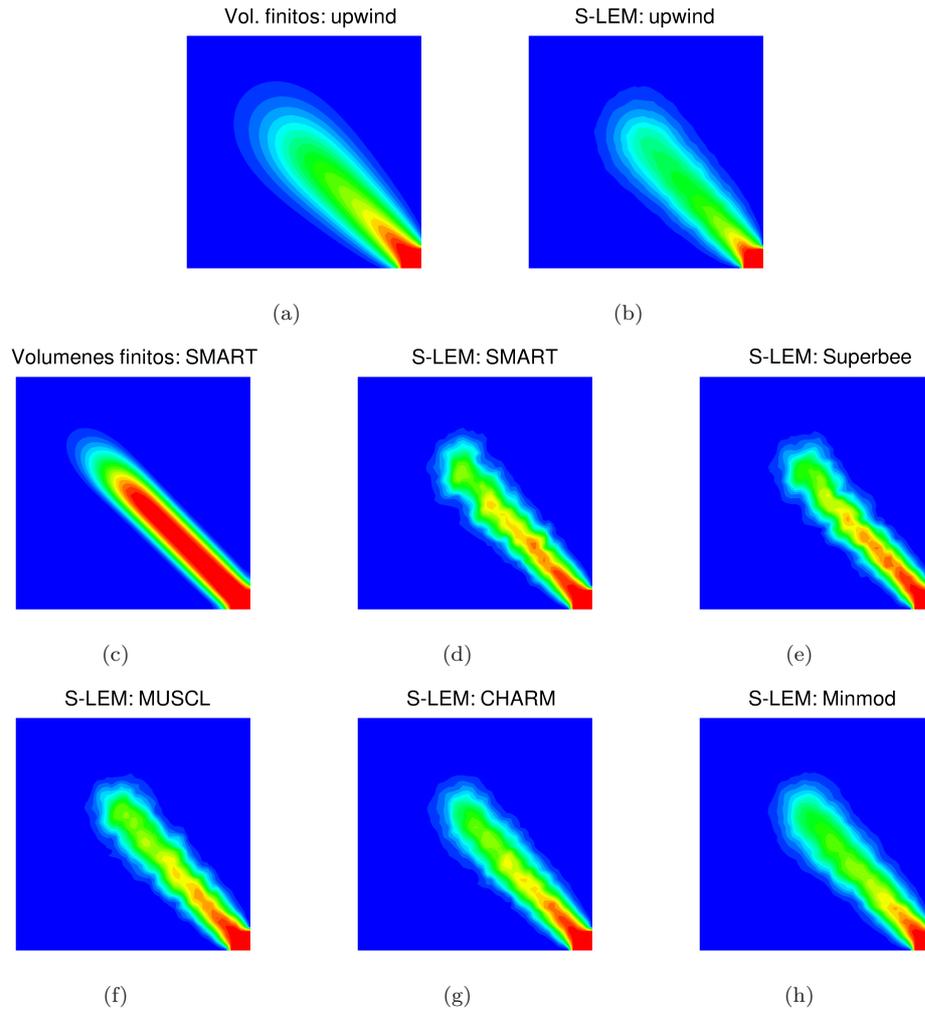


Fig. B.6: Convección bidimensional de un escalar usando distintos esquemas de discretización

En concordancia con los resultados en 1D, cabría esperar que los contornos fueran más similares a los de volúmenes finitos conforme hubiera mayor intensidad en el mezclado submalla, principalmente por difusión molecular; aunque a cambio, la varianza de la distribución se vería disminuida. En la Figura B.7 se presentan los contornos del escalar para el esquema Superbee, con el respectivo campo de varianzas, para $Sc=0.7$ y $Sc=0.01$. Como se observa, el contorno en B.7 presenta menos alteraciones en el transporte, aunque, a cambio, la varianza submalla ha disminuido aproximadamente en el mismo orden de magnitud que el Sc . En un caso práctico, obviamente, los parámetros del mezclado submalla estarán impuestos por las propiedades del fluido (difusión molecular) y del

flujo (convección turbulenta); sin embargo, esta figura pretende señalar que el esquema de alto orden actúa sobre las distribuciones y que las diferencias mostradas con volúmenes finitos son inherentes al algoritmo de *splicing* implementado en esta tesis.

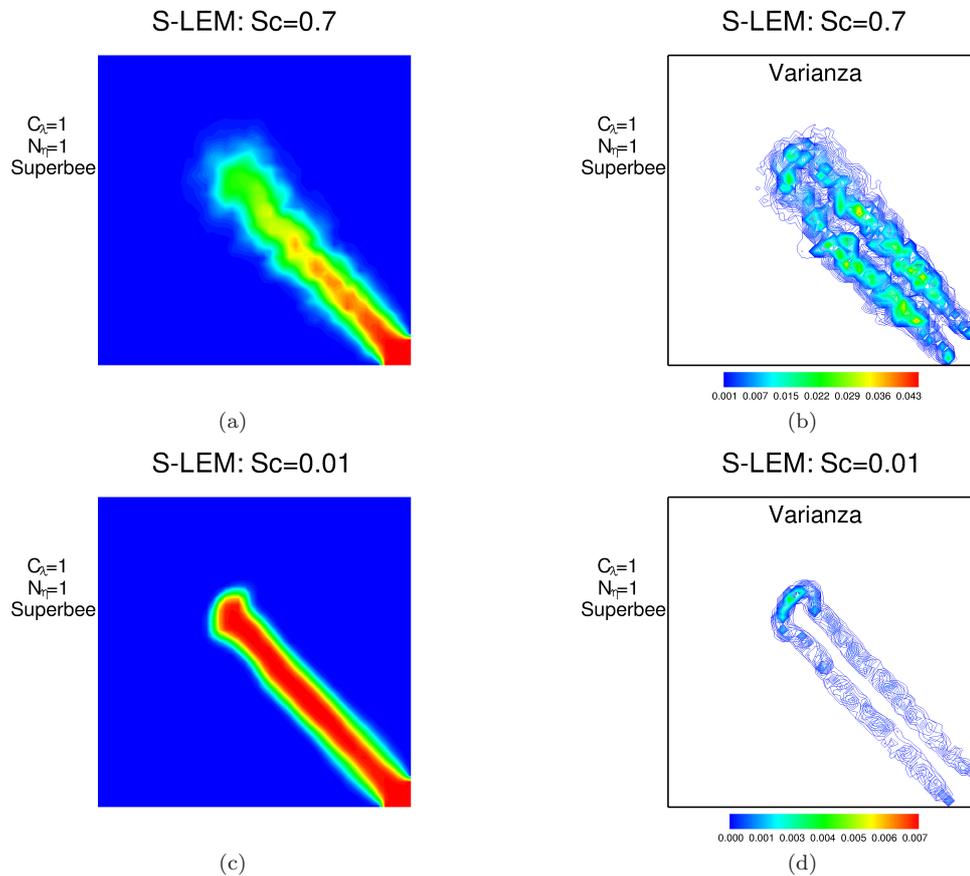


Fig. B.7: Contornos 2D para un escalar transportado y su respectiva varianza submalla determinados mediante *S-LEM* para dos valores de Sc con un esquema de alto orden

B.2.2. Aplicación a un caso práctico

Una de las configuraciones analizadas en esta Tesis es la llama D de Sandia. Los detalles de la configuración pueden consultarse en el Capítulo 6. En este apartado se presenta brevemente la influencia del esquema modificado (EDNR, Esquema de Difusividad Numérica Reducida) para *S-LEM* en los resultados. En la Figura B.8 se muestran los perfiles de la fracción de mezcla media $\langle \xi \rangle$ en tres estaciones axiales de la llama D determinados mediante volúmenes finitos (SMART) y *S-LEM* con el *splicing* convencional e incorporando el EDNR (Superbee). Puede observarse que la corrección mejora notablemente los resultados, sobre todo aguas abajo de la boquilla, donde la turbulencia es más intensa.

B.3. Conclusiones

En este apéndice se ha presentado un análisis de la convección por las grandes escalas del modelo *S-LEM*. Para el estudio se han usado dominios simples en los que se examina el transporte

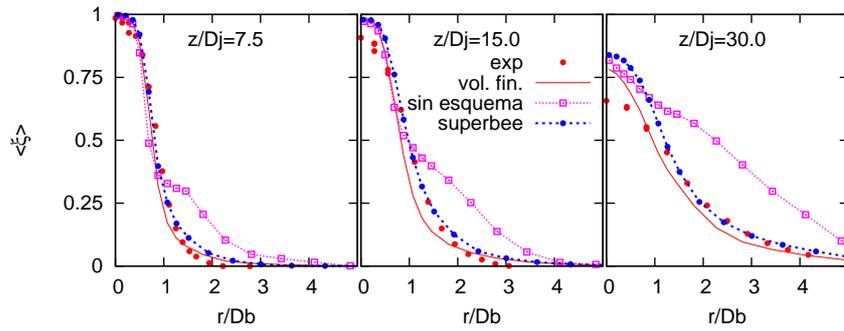


Fig. B.8: Fracción de mezcla media en tres estaciones axiales de la llama D para las predicciones de volúmenes finitos y *S-LEM*

determinado por el modelo. Las predicciones se han comparado con simulaciones para los mismas configuraciones hechas con volúmenes finitos. Mediante la convección en 1D se estudia el efecto del número de elementos del dominio submalla, mostrando que a menor partículas, el frente del escalar presenta deficiencias en su localización, aunque a partir de cierto número de elementos, este efecto ya es prácticamente nulo. El frente presenta una perturbación debida al carácter estocástico del método. El mismo caso se ha empleado para estudiar los efectos en el transporte de los parámetros que modifican el mezclado submalla: C_λ , N_η y el número de Schmidt; encontrando que a mayor intensidad en el mezclado submalla, las perturbaciones del frente disminuyen. Sin embargo, la varianza submalla se ve afectada. Asimismo, se ha propuesto la incorporación de términos de corrección de alto orden al algoritmo de *splicing* de manera a través de la técnica de la corrección diferida, habitualmente usada en volúmenes finitos. La corrección, denominada EDNR, ha sido evaluada en la convección diagonal de dos fluidos, consiguiendo un mejor comportamiento en los contornos del escalar con respecto al transporte de primer orden, principalmente usando los esquemas Superbee y SMART. Estas mejoras se ven confirmadas en los perfiles radiales en tres estaciones axiales de la llama D de Sandia, donde el transporte de *S-LEM* con EDNR es muy similar al de volúmenes finitos y a los valores experimentales medios.

Apéndice C

Caso test: Flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado

En este Anexo se presentan la aplicación de la Simulación de las Grandes Escalas (*LES*) a un flujo turbulento no reactivo empleado como caso *test* para la validación y evaluación de los esquemas y modelos incorporados al solver principal. Entre estos, se analizan principalmente la influencia de los modelos de turbulencia y esquemas de discretización de alto orden para los términos temporal y convectivo de las ecuaciones del movimiento. El caso *test* corresponde a un flujo turbulento sobre un cuerpo de sección cuadrada, tras del cual, se origina un desprendimiento de vórtices. El número de Reynolds es de 21400. El flujo ha sido estudiado por diversos autores tanto experimental como numéricamente y es usado ampliamente para la validación de modelos de turbulencia. En este documento se analiza la influencia de los modelos de *LES* y de algunos esquemas de discretización empleados, comparando los resultados con los datos experimentales disponibles y con el modelado del flujo en *RANS*. Parte del análisis realizado ha sido documentado en [170] y [171].

C.1. Configuración experimental

El caso abordado en este anexo corresponde a un flujo turbulento sobre un cilindro cuadrado (también llamado varilla o barra). La configuración experimental detallada en [139] y [138] corresponde a un flujo de agua sobre un canal de 39 x 56 cm de sección transversal. El diámetro del cilindro (D), utilizado para adimensionalizar todas las distancias, es de 4 cm y su longitud se extiende a todo el ancho del canal. La velocidad de referencia (U), medida en la entrada del dominio, es de 53.5 cm/s. El número de Reynolds, basado en U y D , es de 21400. La frecuencia de desprendimiento de vórtices estimada es de 1.77 Hz, que corresponde a un número de *Strouhal* ($St = fD/U$) igual a 0.132. El periodo de formación de los vórtices ha sido dividido en 20 intervalos de tiempo (fases) en los cuales se han registrado los valores de las componentes de la

Tabla C.1: Principales parámetros del experimento de Lyn *et al.* ([139] [138])

Parámetro	Medida
Sección rectangular del cilindro	40.0 x 40.0 mm
Velocidad a la entrada	$U = 535$ mm/s
Número de Reynolds	$Re = UD/\nu = 21400$
Intensidad de turbulencia a la entrada	2 %
Anchura del canal	$W = 400$ mm
Altura del canal	$H = 560$ mm
Número de Strouhal	$St = 0.132$

velocidad y sus fluctuaciones en varios puntos del flujo. Un resumen de los principales parámetros del experimento se presentan en la tabla C.1.

C.2. Antecedentes

Dadas el avance en los equipos de cómputo y las ventajas que sobre *RANS* tiene en la simulación de flujos turbulentos, *LES* es una opción atractiva que cada vez es más empleada en el cálculo de configuraciones con geometrías que incluyen escalones o obstáculos (*bluff-bodies*) que crean zonas de recirculación en el flujo. Dentro de estas configuraciones, se encuentran casos que se han convertido en clásicos en lo que al estudio numérico de la turbulencia se refiere. Un ejemplo de estos, es el flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado, tras del cual se da un desprendimiento de vórtices [73],[215]. Este tipo de flujos son de gran relevancia en problemas técnicos asociados principalmente con el análisis estructural en diversas aplicaciones industriales y ambientales. Gran parte del estado del arte de *LES* aplicado a este tipo de configuraciones ha sido resumido en los dos *Workshops* que sobre este tipo de casos se han realizado [216] [217] y cuyos resultados ha recogido el ERCOFTAC en su sitio web [66]. Sin embargo, a pesar del número de grupos y contribuciones realizadas, aun han quedado cuestiones que no han sido resueltas satisfactoriamente. Por ejemplo, entre las principales conclusiones se ha señalado la imposibilidad de elegir un esquema y/o modelo óptimo, al menos entre los empleados en el *workshop*, para este tipo de sistemas. Por tal motivo, el flujo ha seguido siendo estudiado numéricamente y habitualmente es un caso test para validar esquemas numéricos y modelos de turbulencia (por ej. [21] [243] [140] [164]).

En general, los esquemas numéricos para la discretización de los términos convectivos en las ecuaciones de transporte de *LES* es motivo aún de análisis e investigación. En la actualidad, existe un relativo consenso en emplear esquemas basados en diferencias centradas (CDS), evitando los basados en interpolaciones *upwind* debido a su inherente disipación numérica [224] [164]. Sin embargo, los esquemas CDS no están libres de inconvenientes ya que es común que produzcan oscilaciones (*wiggles*) numéricas, desestabilizando el proceso iterativo de una solución. Adicionalmente, se ha determinado que pueden incrementar los errores de *aliasing* en ausencia de mecanismos que disipen la energía de las pequeñas escalas [207]. En la literatura existen, por tanto, cálculos con *LES* empleando esquemas de alto orden basados en interpolaciones *upwind*. Así por ejemplo, en el *workshop* donde se analiza este flujo, dos grupos han reportado el uso del esquema QUICK y otro un esquema *upwind* de tercer orden [216] (ver también [21]).

En cuanto a los modelos de turbulencia para los esfuerzos residuales τ_{ij}^s , a pesar de los inconvenientes atribuidos al modelo estándar de Smagorinsky (ver el Capítulo 3), éste es ampliamente utilizado en la actualidad con resultados satisfactorios. Trabajos recientes como el de Fureby *et al.* [77] han concluido que los resultados en *LES* son prácticamente independientes del modelo de turbulencia utilizado si el número de onda asociado a la longitud de filtrado cae dentro del subrango inercial (ver fig. 3.1). Sohankar *et al.* [243] han analizado el caso empleando varios modelos y han concluido que las diferencias son del mismo orden o menores a las que se pueden atribuir a un aumento en la resolución de la malla. De igual manera, Bouris y Bergeles [21], mediante cálculos con *LES* en dos dimensiones, concluyen que la correcta selección del mallado, principalmente alrededor del cilindro cuadrado, es más importante que el tipo de esquema o modelo empleado.

Así pues, esta configuración es aun analizada en la actualidad y es empleada comúnmente como caso *test* para validar modelos de turbulencia tanto para *RANS* como para *LES* y en ese contexto es empleada en esta tesis para evaluar los esquemas y modelos implementados al solver principal de las ecuaciones de transporte. Los detalles y resultados experimentales y numéricos empleados en este análisis han sido tomados de la base de datos de ERCOFTAC [66].

C.3. Detalles numéricos

En el presente análisis se han realizado cálculos numéricos en 2D y 3D. La turbulencia es un fenómeno inherentemente tridimensional. Trabajos similares (por ej. [214], [161]) muestran que las simulaciones en 2D son claramente inferiores a los tridimensionales, dado que ciertas características de la turbulencia no son resueltas, como la formación de vortices en el eje coordenado no considerado. Por otro lado, algunos trabajos como el de Bouris *et al.* ([21]) han concluido que existen mecanismos prácticamente bidimensionales que pueden ser calculados con exactitud mediante mallas 2D y *LES*, principalmente en zonas cercanas a paredes (refinando la malla en estas áreas), con el consiguiente ahorro en tiempo de cómputo con respecto a un cálculo 3D que justifica esta decisión. El propósito de los cálculos en 2D en este análisis ha sido evaluar los efectos de los esquemas numéricos de alto orden y la influencia de la malla de una manera computacionalmente económica.

El dominio computacional se muestra en la figura C.1. Las dimensiones son las que sugiere el *workshop*, de tal forma que las condiciones impuestas en las fronteras del dominio afecten lo menos posible el flujo alrededor de la varilla [216] [217] [66]. Se ha empleado el código PHOENICS [186] para dar solución a las ecuaciones filtradas que describen la dinámica del flujo descritas en el Capítulo 3. El método utilizado para la discretización de las ecuaciones es el de volúmenes finitos (sec. 5.2).

En los cálculos en bidimensionales se ha empleado, en la mayor parte de los casos, una malla de 200x140 nodos. La selección de este mallado se ha basado principalmente en el uso de un número de nodos similar a los reportados en el *workshop*.

Los esquemas de discretización para el término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento que se han analizado son:

- diferencias centradas *CDS*,
- SMART (QUICK acotado) y

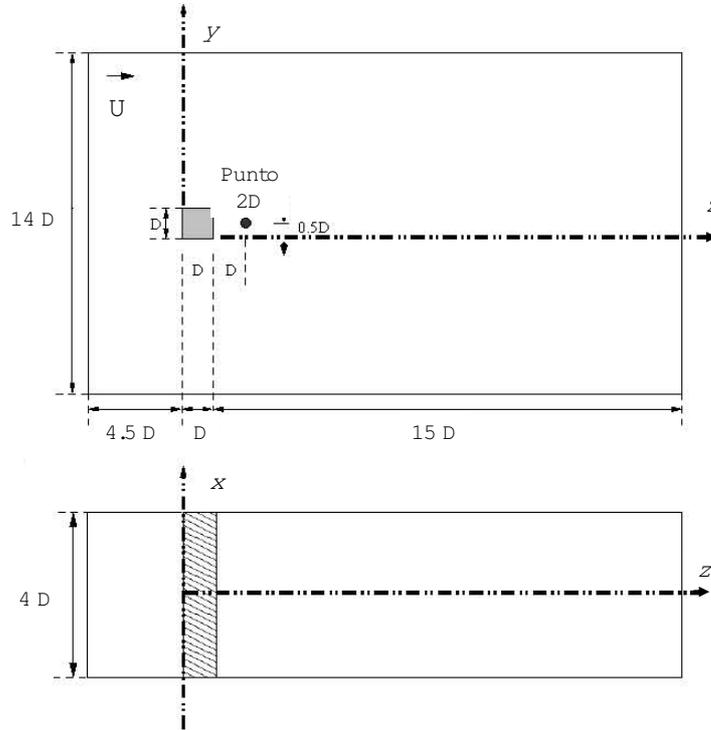


Fig. C.1: Dominio y geometría del flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado

- Van Leer, *VANL*.

Para la integración temporal se ha empleado el esquema implícito de tercer orden de Adam-Moulton según los requisitos señalados en la Sección 5.4. Los principales detalles relativos a los esquemas de integración espacial y temporal pueden encontrarse en el apéndice A.

En las paredes del cilindro se ha impuesto la condición de no deslizamiento así como el uso de leyes de pared y funciones *damping* en los nodos contiguos.

Adicionalmente a las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento, se ha resuelto una ecuación de transporte para un escalar inerte, denominado ξ , con el único propósito de visualizar mejor los torbellinos aguas abajo del cilindro. La condición de contorno para ξ en la entrada es tal que, $\xi = 1$ para la mitad del dominio en el eje y (equivalente a $7D$) y $\xi = 0$ para la otra mitad. En todo caso, para la discretización de este escalar se emplea el esquema acotado SMART, de modo que su solución se mantenga en el rango $[0, 1]$ y evitar inestabilidades en su solución.

En cada paso temporal se realizan cálculos auxiliares para posteriormente determinar valores estadísticos como medias y fluctuaciones *rms* una vez que el flujo ha adquirido un comportamiento cíclico. Un posterior procesamiento de los datos permite determinar los parámetros más importantes del flujo. El número de Strouhal (frecuencia de desprendimiento de vórtices adimensionalizada), se ha calculado como:

$$St = \frac{fD}{U} \quad (C.1)$$

donde f es la frecuencia de desprendimiento de vórtices determinada a través de una transformada de Fourier de la señal volcada en el punto 2D (ver fig. C.1). D es el diámetro del cilindro cuadrado, U es la velocidad de referencia (velocidad media a la entrada del dominio) y l_r es la longitud de recirculación medida a partir del origen marcado en la fig. C.1 y adimensionalizada con D . Se han calculado además los coeficientes de arrastre C_D y de sustentación C_L , así como la amplitud de la oscilación de cada uno de ellos (C_D^{rms} y C_L^{rms}). Las expresiones que definen estos parámetros son:

$$C_D = \frac{F_{horizontal}}{\frac{1}{2}\rho U^2 A_{sq}}, \quad C_L = \frac{F_{vertical}}{\frac{1}{2}\rho U^2 A_{sq}} \quad (C.2)$$

donde U es la velocidad de referencia y A_{sq} el área proyectada de la varilla. Las fuerzas F , para cada una de las caras del cilindro, son determinadas a partir de la expresión:

$$\vec{F} = \int_s \vec{n} \cdot \vec{\tau} ds \quad (C.3)$$

siendo $\vec{\tau}$ el tensor de esfuerzos, definido a su vez como $\vec{\tau} = -p\vec{I} + \tau^i_j$; donde p es la presión, \vec{I} es el tensor identidad y τ^i_j es el tensor de esfuerzos viscosos, que para un fluido incompresible vale (en notación indicial y en variables filtradas), $\tau^i_j = 2\mu\bar{e}_{ij} = 2\mu(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j})$

C.4. Resultados

C.4.1. Simulaciones en dos dimensiones

En esta sección se presenta el análisis de los esquemas de discretización y la influencia de la simulación a parámetros como la malla, el tamaño de paso temporal y condiciones de contorno alrededor del cilindro. Al margen del carácter inherentemente tridimensional de la turbulencia, el trabajo de Bouris *et al.* ha demostrado que los mecanismos principales de esta configuración pueden ser correctamente determinados mediante cálculos bidimensionales con mallas de adecuada resolución en la zonas de cilindro y de formación de vortices. De cara a una simulación tridimensional, y por tanto computacionalmente más costosa, una evaluación previa de la influencia de los esquemas y modelos numéricos en los principales parámetros y estadísticas del flujo, redundará en un equilibrio adecuado entre exactitud y coste computacional en configuraciones de este tipo.

Influencia de los esquemas numéricos

En este apartado se analiza el comportamiento de los esquemas numéricos de discretización espacial y temporal, así como del modelo de Smagorinsky en el flujo. Para estos cálculos se ha optado por una malla de 200x140 nodos distribuidos uniformemente y con la que sólo se pretende analizar el comportamiento numérico de los esquemas sin pretender obtener una aproximación con los datos experimentales. Tan sólo en algunos casos, éstos últimos se han utilizado como valores indicativos o de referencia. En la gráfica C.2 muestra la velocidad vertical monitorizada en un punto situado a $2D$ en dirección z del origen del dominio. Las señales producidas al incorporar al solver principal los esquemas numéricos de discretización espacial (gráfica superior), el de discretización temporal (central) y el modelo estándar de Smagorinsky (parte baja) se comparan en todos los casos con la señal producida resolviendo las ecuaciones sin emplear ningún esquema o modelo.

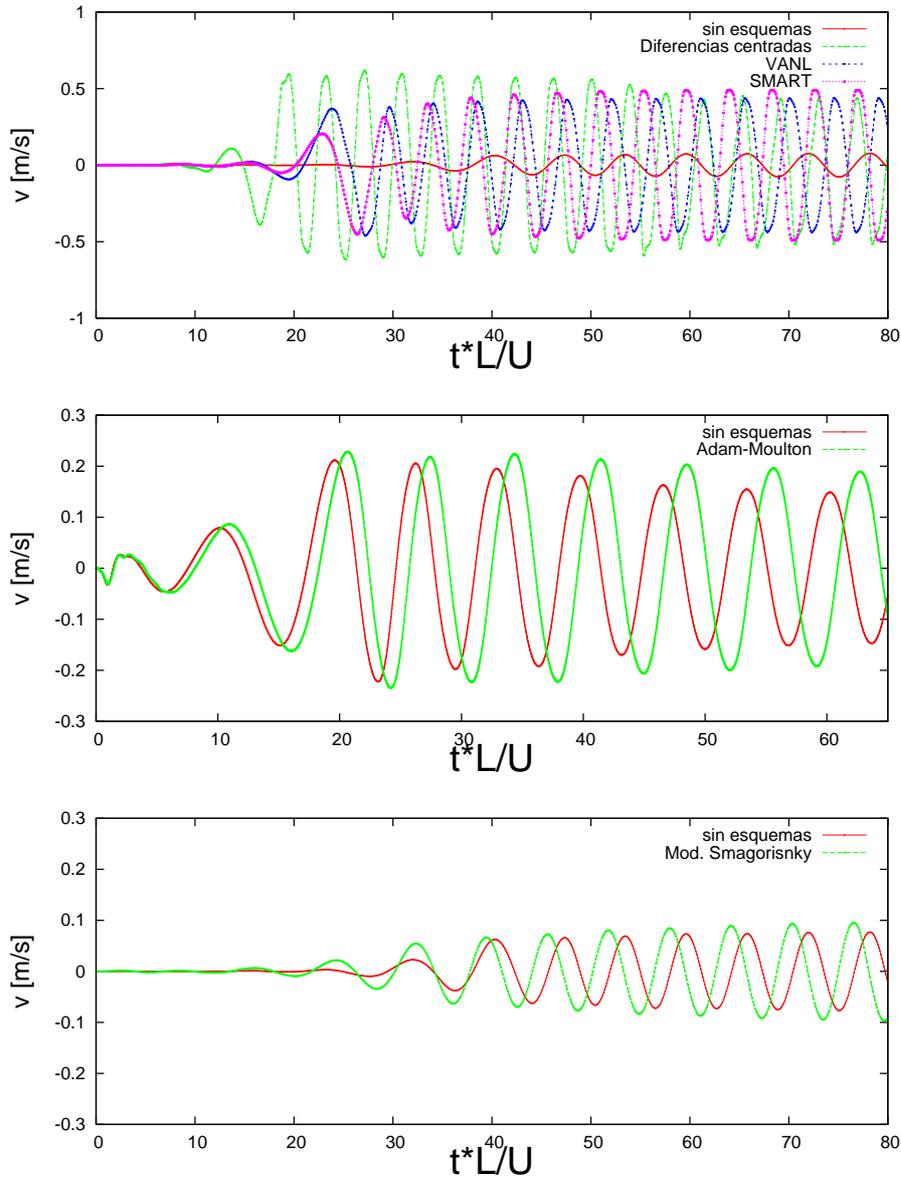


Fig. C.2: Efecto en la velocidad vertical v de los esquemas de discretización espacial (arriba), temporal (en medio) y modelo de Smagorinsky (abajo) en el punto 2D

Se puede observar que el aspecto que más influye en la solución es la incorporación del esquema espacial, puesto que modifica completamente la señal incrementando su amplitud en más del doble, siendo ésta aproximadamente igual para los tres esquemas empleados, al margen de las distintas frecuencias observadas. Un efecto similar puede observarse en la figura C.2. En la parte izquierda de esta figura se presenta la velocidad axial media a lo largo del eje central del dominio (en $y = 0$) donde puede verse que los tres esquemas espaciales mantienen un comportamiento similar en la longitud de recirculación l_r en valores de $l_r \approx 1,8$ mientras que no aplicando estos esquemas este valor es prácticamente el doble ($l_r \approx 3,3$). Los valores experimentales se han puesto en esta gráfica como indicativos de la precisión en los cálculos. En el caso del esquema de diferencias centradas

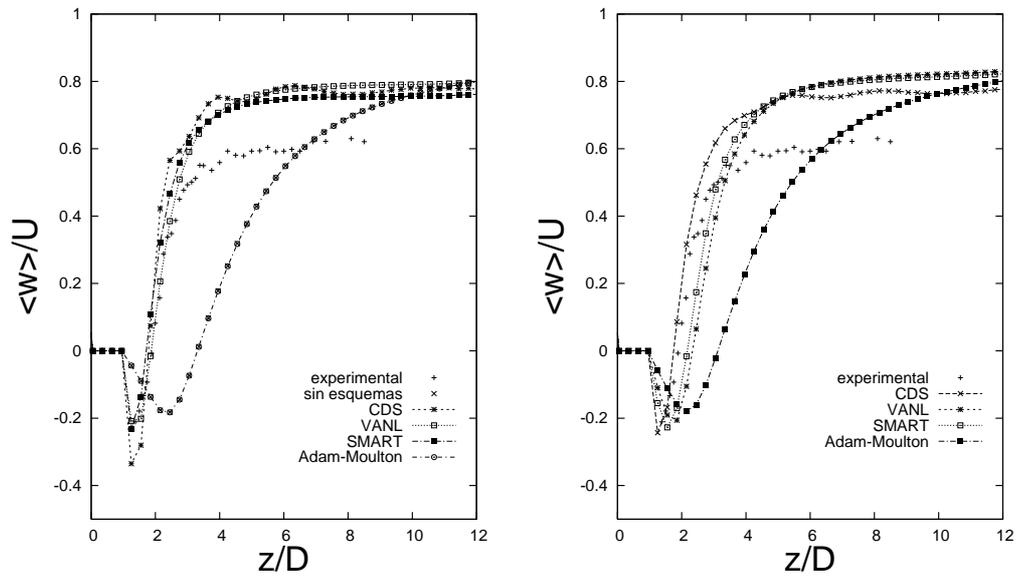


Fig. C.3: Efecto de los esquemas de discretización en la velocidad axial media $\langle w \rangle$ sobre el eje central del dominio para diferentes esquemas de discretización con el modelo de Smagorinsky desactivado (izquierda) y activado (derecha).

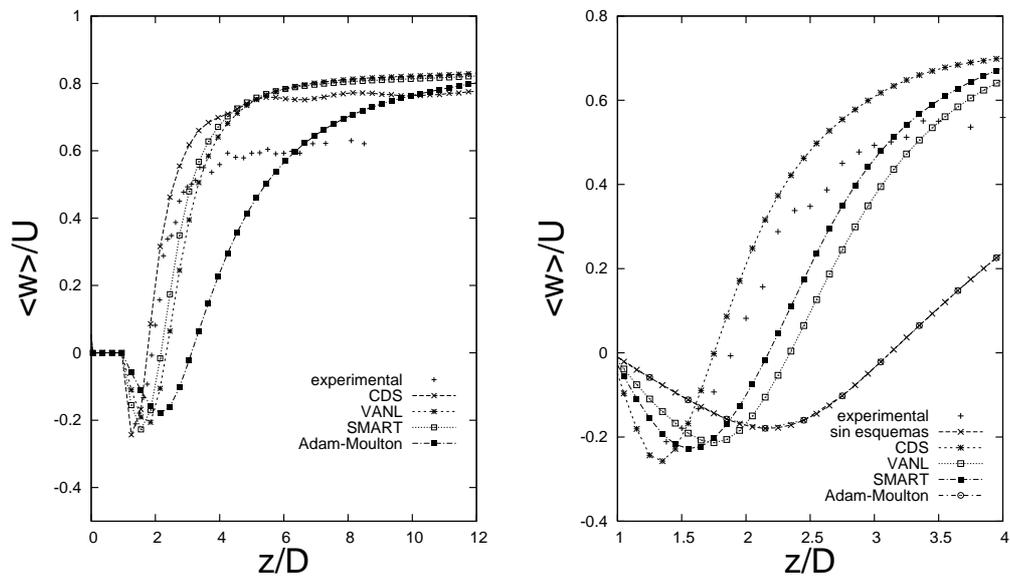


Fig. C.4: Efecto de los esquemas de discretización en la velocidad axial media $\langle w \rangle$ sobre el eje central del dominio incorporando el modelo estándar de Smagorinsky, (en la derecha se hace un zoom en la zona de recirculación)

(CDS) se observa un valor negativo en la velocidad de recirculación mucho más pronunciado que para los otros casos, fenómeno que puede atribuirse a una menor disipación numérica de este esquema. Algo similar puede observarse en la parte derecha de la misma figura C.2, donde en la sección inmediata aguas abajo del cilindro, el esquema CDS determina valores más amplios en la velocidad radial. En cuanto al esquema de integración numérica, en ambas gráficas puede observarse

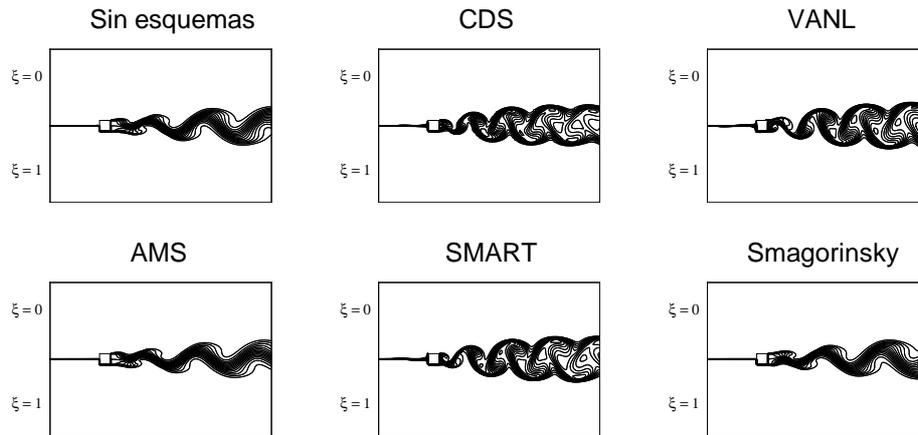


Fig. C.5: Patrón del flujo capturado a través del escalar ξ incorporando los esquemas numéricos analizados y el modelo de Smagorinsky

que su efecto es tal que prácticamente no afecta la estadística del flujo. En la figura C.4 se puso de igual modo la velocidad axial en el eje central, pero incluyendo ahora el efecto del modelo de Smagorinsky. Se puede observar que en este caso, la velocidad de recirculación determinada con el modelo CDS predice una recirculación similar a los demás esquemas y se ajusta mejor a los valores experimentales, fenómeno que se aprecia mejor en el gráfico de la parte derecha de esta figura. En la figura C.5 se aprecia el patrón de flujo formado principalmente aguas abajo del cilindro a través del escalar ξ . Globalmente, puede observarse la importancia de emplear los esquemas espaciales de alto orden para capturar el desprendimiento de vortices.

En lo que respecta a los parámetros integrales definidos en la Sección C.3, los resultados muestran que los parámetros más sensibles son el coeficiente de arrastre C_D y el número de Strouhal St . En la figura C.6 se muestra la variación que sufren estos parámetros de acuerdo con el esquema empleado. Por su parte, el C_D muestra mayor variabilidad en ausencia del modelo de Smagorinsky. Contrario al efecto del esquema CDS, los esquemas *upwind* tienden a sobreestimar el arrastre, fenómeno que es compensado con la aparición de la viscosidad turbulenta determinada alrededor del cilindro, lo que indica una preponderancia de la disipación por efectos del modelo de turbulencia sobre la disipación numérica. En cuanto al número de Strouhal, acorde con el comportamiento observado en figuras anteriores, la frecuencia en el desprendimiento de vortices es modificada con el uso de los esquemas espaciales de alto orden, tendiendo a aumentarla, lo cual es más notorio en el esquema CDS cuando carece de mecanismos de disipación; siendo ligeramente amortiguada en todos los casos mediante la activación del modelo de turbulencia.

Influencia de la malla

En el gráfico izquierdo de figura C.7, se muestra la velocidad axial media en el eje central del dominio usando cuatro mallas diferentes en simulaciones bidimensionales. A medida que se incrementa la resolución de la malla se observa que se predice una recuperación más rápida de la velocidad axial, sin embargo, la velocidad media de recirculación (valores negativos) es prácticamente la misma en todos los casos. La disparidad entre datos es mayor conforme se avanza aguas

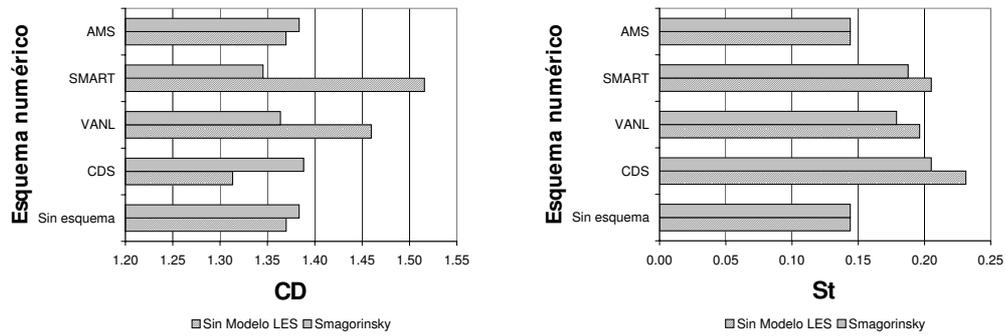


Fig. C.6: Coeficiente de arrastre medio, $\langle C_D \rangle$, (izquierda) y número de Strouhal, St , (derecha) determinado con los distintos esquemas de discretización empleados

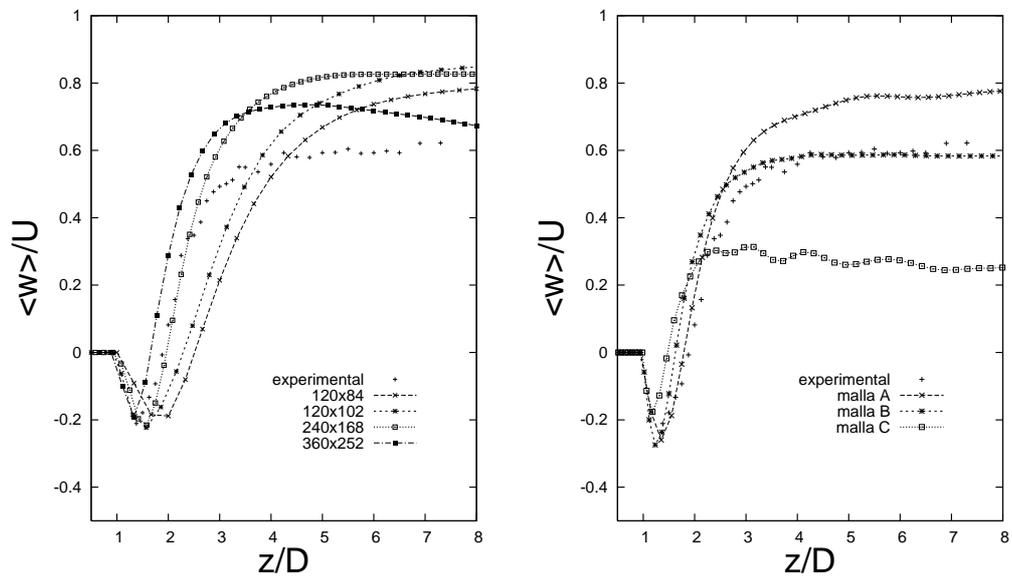


Fig. C.7: Velocidad axial media $\langle w \rangle$ en el eje central del dominio para el flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado. En el lado izquierdo se emplean cuanto mallas distintas; en el derecho, el mismo número de nodos (200x140) pero con espaciado diferente en cilindro (malla A: 10x10; malla B:20x20; malla C: 30x30)

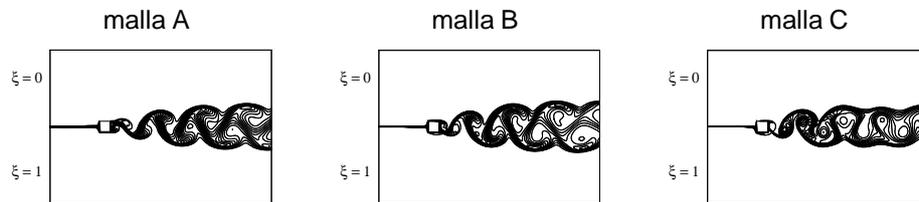


Fig. C.8: Patrón del flujo capturado a través del escaler ξ empleando 200x140 nodos y diferente resolución en área de cilindro(malla A: 10x10; malla B:20x20; malla C: 30x30)

abajo del flujo. En el lado derecho de la misma figura C.7 se ha comparado los datos de simulaciones empleando el mismo número de nodos totales (200x140), pero con diferente discretización en el área del cilindro cuadrado:

- 10x10 (malla A),
- 20x20 (malla B) y
- 30x30 (malla C).

En todos los casos se han empleado los esquemas AMS y CDS, junto con el modelo de Smagorinsky, y un mismo valor de paso temporal. En las mallas B y C el espaciado en los ejes y y z va cambiando gradualmente ajustándose al espaciado en el área del cilindro. El incremento de nodos en el cilindro reduce ligeramente el área de recirculación así como la frecuencia del desprendimiento de vórtices; por otro lado, incrementa el valor calculado de algunos de los parámetros integrales como el coeficiente de arrastre y las fluctuaciones de ambos coeficientes, según se observa en la tabla C.2. Sin embargo, según se ha visto en C.7, aguas abajo del cilindro, la disminución de la resolución en la malla predice una menor recuperación de la velocidad, fenómeno acentuado en la malla C, la cual, con mayor número de nodos en el cilindro, no mejora significativamente el cálculo de los parámetros integrales comparados con los valores experimentales para el flujo. Otros análisis [216] [217] han determinado similares comportamientos que corroboran la dificultad en la obtención de resultados independientes del tipo de malla en *LES*. En la figura C.8 se puede observar el patrón de flujo en las tres mallas, puede verse que la malla C no es capaz de predecir correctamente el flujo aguas abajo del cilindro debido a la resolución en los nodos en esta zona.

Tabla C.2: Parámetros integrales determinados en simulaciones 2D para 3 diferentes mallas y mismo tamaño de paso temporal Δt

Caso	$\langle C_L \rangle$	C_L^{rms}	$\langle C_D \rangle$	C_D^{rms}	St	l_r
Malla A	0.0050	0.1731	1.376	0.036	0.23	1.79
Malla B	-0.0106	0.4585	2.156	0.182	0.16	1.63
Malla C	-0.0060	0.4988	2.206	0.154	0.16	1.47
Exp Lyn <i>et al.</i> [139] [138]	-	-	2.1	-	0.132	1.88

Influencia del paso temporal

En cuanto al tamaño de paso temporal, al estar usando un esquema totalmente implícito, en general, éste no debería afectar los resultados notablemente, al menos en lo que se refiere a las estadísticas globales del flujo. De acuerdo a los criterios de precisión señalados en la Sección 5.4, para una simulación con *LES*, el tamaño de paso temporal debe capturar la menor escala resuelta del movimiento del flujo, es decir, $\Delta t \approx \Delta t_{CFL}$. En esquemas de integración temporal explícita, este criterio condiciona el tamaño de paso temporal Δt para no comprometer la estabilidad de la solución. Cuando en un dominio ciertas zonas requieren de una mayor resolución en la malla (más número de nodos y por tanto, celdas más pequeñas), por ejemplo cerca de paredes, Δ_{CFL} podría ser muy pequeño y elevar considerablemente el tiempo de cálculo. El esquema empleado en este trabajo es implícito y por tanto, Δt no queda sometido a la condición de Courant para la

estabilidad. En este apartado se ha analizado la influencia del tamaño del paso temporal Δt en la simulación del flujo y su relación con la resolución de la malla para esta configuración.

Para este análisis, se ha definido un tamaño de paso temporal Δt_g (ligado a los parámetros globales de la malla y el dominio) definido de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\Delta t_g = \frac{L_z}{n_z U} \quad (\text{C.4})$$

donde L_z es la longitud del dominio en z y n_z el número de nodos en esta dirección. Puesto que en el análisis la malla es refinada en la zona del cilindro y, por tanto, la celdas son más pequeñas en esta área, se ha definido un valor de paso temporal que cumple en esta zona que $\Delta t_{CFL} \approx 1$:

$$\Delta t_{sq} = \frac{D}{n_{sq} U} \quad (\text{C.5})$$

donde D es el diámetro del cilindro cuadrado y n_{sq} el número de nodos en que se discretiza esta longitud. Tanto en C.4 como en C.5, U es la velocidad de referencia.

Se han analizado las mallas A, B y C, que al poseer el mismo número de nodos (200x140), Δt_g es el mismo en los tres casos.

En la figura C.9 se presentan las velocidades medias en el eje central del dominio empleando tres tamaños de paso temporal: $1.5\Delta t_g$, $1.0\Delta t_g$ y $0.5\Delta t_g$ para la malla A. Puesto que para esta malla A se emplea un espaciado uniforme se cumple que: $\Delta t_g = \Delta t_{sq} \approx \Delta t_{CFL}$.

En la velocidad axial puede apreciarse una ligera disminución en la longitud de recirculación empleando pasos temporales más pequeños; se detecta asimismo, diferencias en componente la velocidad radial, aunque en todos los casos guardan un comportamiento similar. En la figura C.10 se muestra la velocidad media y la magnitud de su fluctuación sobre una línea situada sobre la mitad de la pared superior del cilindro, en la mala B. Puede observarse que en todos los casos, los valores medios y *rms* de la velocidad axial prácticamente coinciden, muestran además, la tendencia de los valores experimentales, aunque en el caso de la fluctuación, se predicen valores

Tabla C.3: Parámetros integrales determinados en simulaciones 2D para diferentes tamaños de paso temporal y mallas

Δt	$\langle C_L \rangle$	C_L^{rms}	$\langle C_D \rangle$	C_D^{rms}	St	l_r
Malla A ($\Delta t_g = \Delta t_{sq}$):						
$1.5\Delta t_g$	0.0038	0.1259	1.249	0.019	0.22	2.04
$1.0\Delta t_g$	0.0050	0.1731	1.376	0.036	0.23	1.79
$0.5\Delta t_g$	-0.0042	0.2254	1.527	0.069	0.24	1.60
Malla B ($\Delta t_g = 2\Delta t_{sq}$):						
$1.5\Delta t_g$	-0.0121	0.4582	2.187	0.184	0.13	1.44
$1.0\Delta t_g$	-0.0106	0.4585	2.156	0.182	0.16	1.44
$0.5\Delta t_g$	-0.0054	0.4493	2.072	0.186	0.22	1.46
Malla C ($\Delta t_g = 3\Delta t_{sq}$):						
$1.5\Delta t_g$	-0.0145	0.5032	2.213	0.146	0.13	1.49
$1.0\Delta t_g$	-0.0060	0.4988	2.206	0.154	0.16	1.47
$0.5\Delta t_g$	-0.0109	0.4948	2.230	0.174	0.21	1.45
Exp Lyn <i>et al.</i> [139] [138]	-	-	2.1	-	0.132	1.88

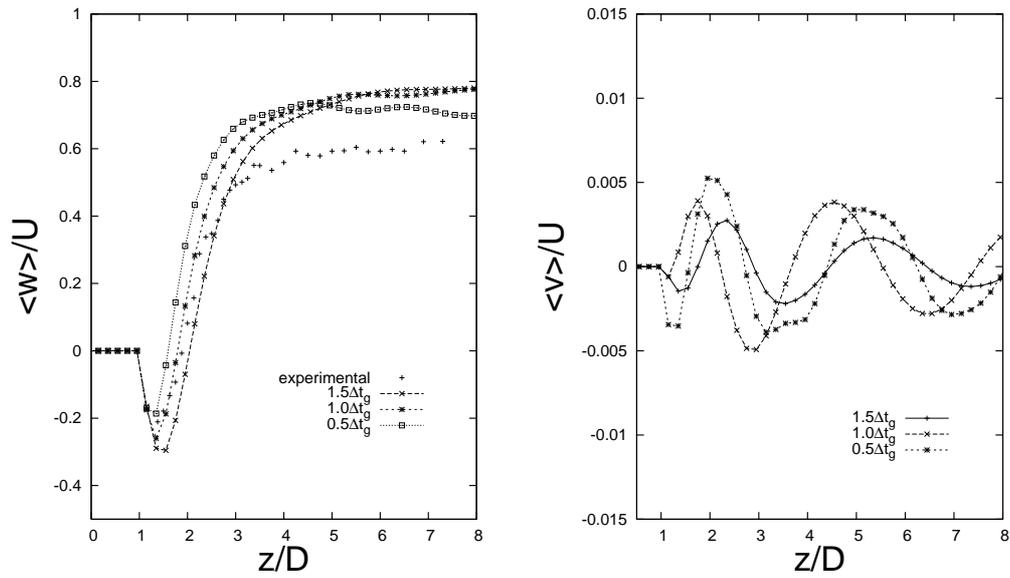


Fig. C.9: Velocidad media axial $\langle w \rangle$ (izquierda) y velocidad radial media $\langle v \rangle$ (derecha) sobre el eje central del dominio para distintos tamaños de paso temporal en malla A.

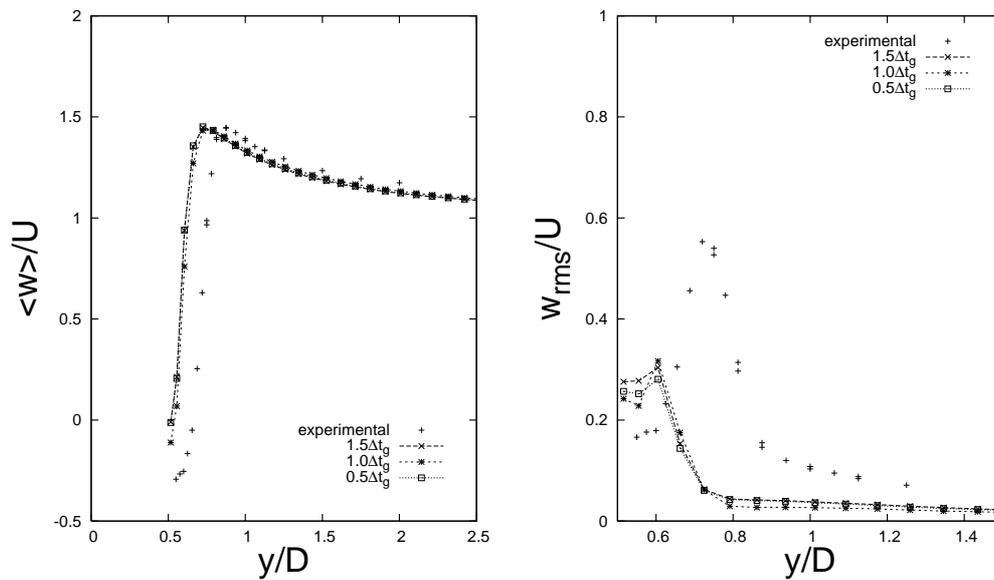


Fig. C.10: Velocidad media axial $\langle w \rangle$ (izquierda) y magnitud de su fluctuación w_{rms} (derecha) sobre la pared superior del cilindro ($\{z, y\} = \{0,5D, 0,5D\}$) para diferentes tamaños de paso temporal (malla B).

Para el caso de usar diferentes mallas manteniendo el tamaño paso temporal en cada una de éstas, en la tabla C.3 se puede observar el comportamiento de los parámetros integrales determinados. Se emplean las mallas A,B y C con tres distintos valores de Δt_g . Puede observarse que, a excepción del número de Strouhal, la dependencia de estas cantidades con el tamaño de paso temporal es muy ligera; comparando con los valores experimentales disponibles, el correcto diseño de la malla resulta ser el factor fundamental en la precisión de los resultados. Esto, que *a priori*

es intuitivo, se confirma también en los patrones del flujo representados en figura C.11. Al poseer las tres mallas el mismo número de nodos y emplear los mismos esquemas numéricos, el coste computacional es el mismo para cada Δt_g y tiempo simulado en cada caso. El paso de la malla A a la B logra una mejora significativa en los resultados, no importando que en la zona alrededor del cilindro $\Delta t_g = 2\Delta t_{sq} \approx 2\Delta t_{CFL}$. Lo anterior, es un indicador de la habilidad del esquema implícito empleado para predecir este tipo de flujos con buena precisión. El uso de más nodos en el cilindro que emplea la malla C no mejora significativamente los parámetros, que aunque son determinados adecuadamente, la malla aguas abajo no es lo suficientemente fina para predecir correctamente el flujo, tal y como se aprecia en la fig. C.11 donde puede observarse el patrón de flujo para cada uno de los casos de la tabla.

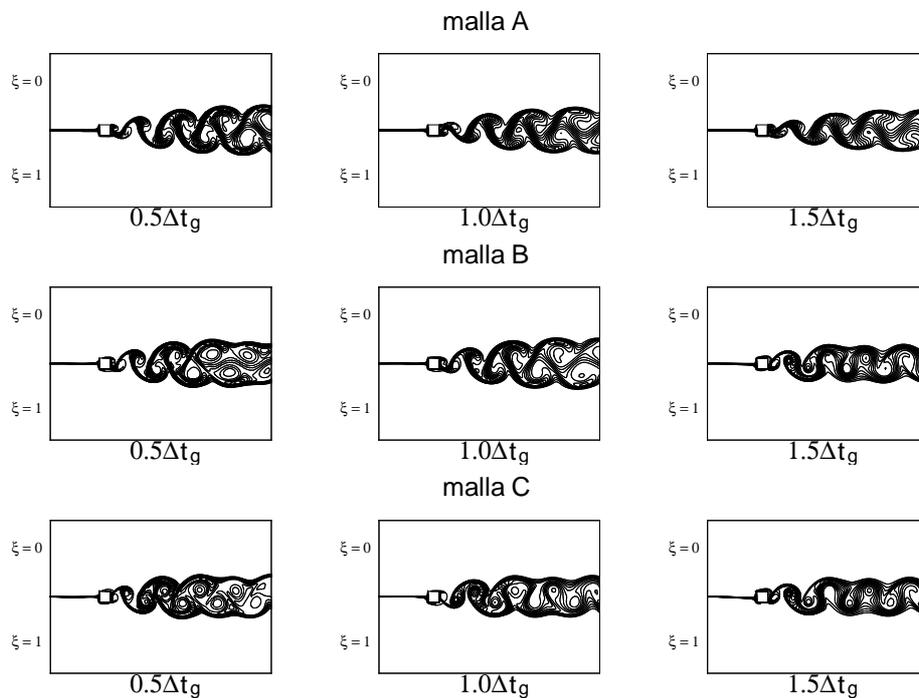


Fig. C.11: Patrón del flujo capturado a través del escalar ξ para diferentes mallas y pasos temporales.

Condiciones de contorno alrededor del cilindro

Una de las conclusiones señaladas en [216] y [217] sobre la variabilidad de resultados obtenidos por distintos grupos para esta configuración es la variabilidad de de condiciones de contorno empleadas en las paredes del cilindro. En este apartado, se han analizado 4 diferentes condiciones de contorno sobre el cilindro:

- condición de no deslizamiento,
- Ley logarítmica de pared,
- Ley logarítmica y función damping cuadrática (ec. 3.37);
- Ley logarítmica y función damping cúbica (ec. 3.38).

En la fig. C.12 se puede observar el valor de la viscosidad turbulenta ν_t en nodos de la pared superior e inferior del cilindro cuadrado. Excepto los primeros nodos aguas arriba de la pared, el valor de la viscosidad es prácticamente nulo

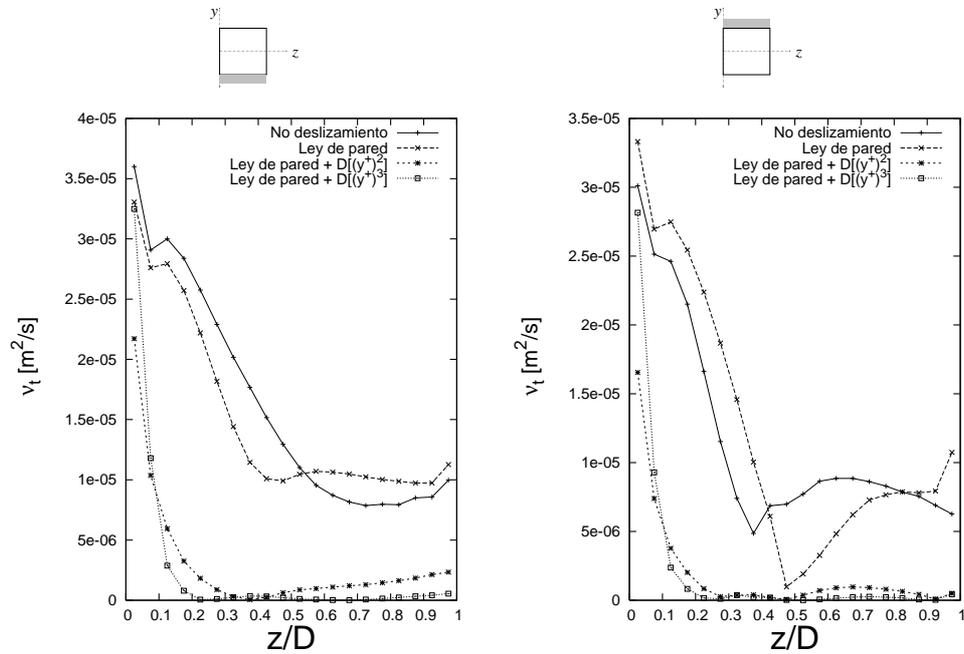


Fig. C.12: Viscosidad turbulenta determinada en los nodos adyacentes a las paredes superior e inferior del cilindro cuadrado para diferentes condiciones de contorno (malla B).

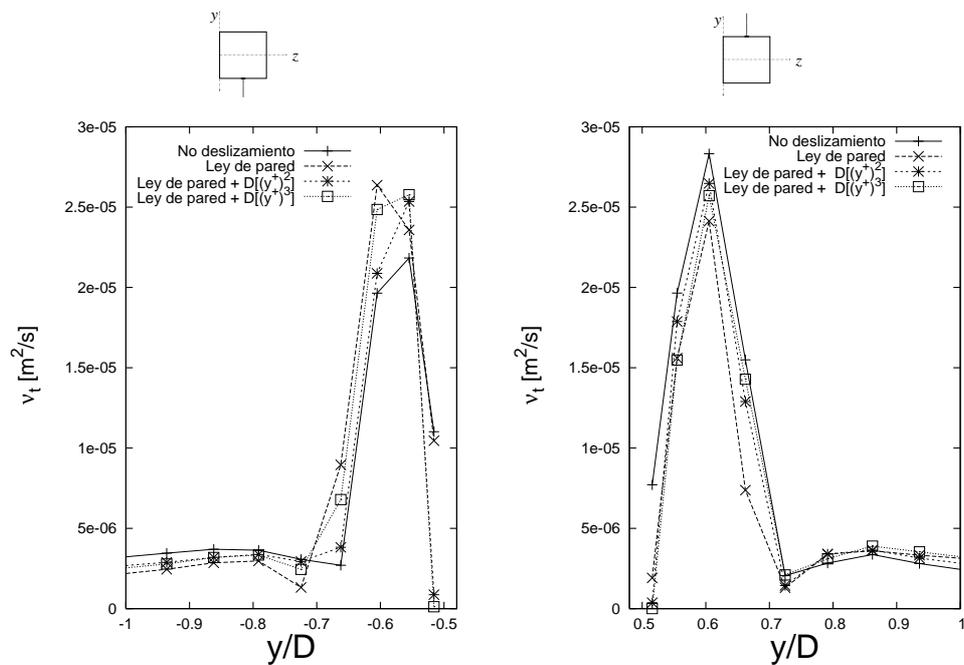


Fig. C.13: Viscosidad turbulenta determinada sobre las paredes inferior (izquierda) y superior (derecha) del cilindro cuadrado para diferentes condiciones de contorno (malla B).

En la tabla C.4 se muestran los parámetros integrales determinados en simulaciones empleando las diferentes condiciones de contorno alrededor del cilindro cuadrado. Como puede verse, el cambio de condición de contorno prácticamente no afecta el cálculo de los parámetros puesto que las diferencias no resultan significativas. En el caso de la condición de no deslizamiento, el coeficiente de arrastre medio es ligeramente mayor debido al menor peso de los términos fuente que estas condiciones de contorno imponen en las ecuaciones de cantidad de movimiento. La frecuencia en el desprendimiento de vórtices se mantiene para todos los casos. Tampoco se muestran diferencias significativas

Tabla C.4: Parámetros integrales determinados en simulaciones 2D para diferentes condiciones de contorno en las paredes del cilindro en la malla B

Caso	$\langle C_L \rangle$	C_L^{rms}	$\langle C_D \rangle$	C_D^{rms}	St	l_r
No deslizamiento	0.0021	0.4878	2.248	0.166	0.16	1.45
Ley de pared	-0.0106	0.4585	2.156	0.182	0.16	1.44
Ley de pared + <i>damping</i> (y^2)	-0.0102	0.4508	2.167	0.191	0.16	1.46
Ley de pared + <i>damping</i> (y^3)	-0.0101	0.4540	2.138	0.174	0.16	1.45

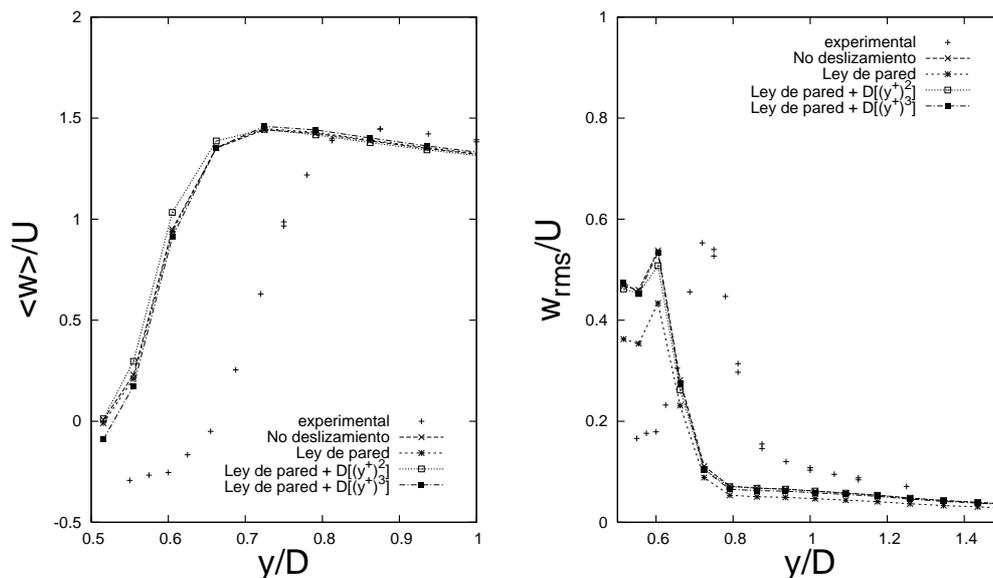


Fig. C.14: Velocidad media axial $\langle w \rangle$ (izquierda) y magnitud de su fluctuación w_{rms} (derecha) sobre la pared superior del cilindro ($\{z, y\} = \{0, 5D, 0, 5D\}$) para diferentes condiciones de contorno en las paredes del cilindro (malla B).

C.4.2. LES en tres dimensiones

Los valores más importantes del flujo inestable alrededor de la barra de sección cuadrada se comparan en la tabla C.5 con los resultados experimentales y numéricos obtenidos por diversos grupos y disponibles en la base de datos del Ercoftac [66]. Se compara el coeficiente de arrastre medio $\overline{C_D}$, la amplitud de su variación C_D^{rms} , el valor medio del coeficiente de sustentación $\overline{C_L}$ y la amplitud de su oscilación C_L^{rms} , y la frecuencia de la oscilación del flujo adimensionalizada en

Tabla C.5: Resultados y comparación de parámetros integrales. Las etiquetas son las mismas que las usadas en [215, 216, 217]

Referencia	Etiqueta	\overline{C}_l	C_L^{rms}	\overline{C}_D	C_D^{rms}	St
Datos numéricos:						
Verstappen and Veldman	GRO	0.005	1.45	2.09	0.178	0.133
Porquie et al.						
-	UK1	-0.02	1.01	2.2	0.14	0.13
-	UK2	-0.04	1.12	2.3	0.14	0.13
-	UK3	-0.05	1.02	2.23	0.13	0.13
Murakami et al.	NT	-0.05	1.39	2.05	0.12	0.131
Wang and Vanka	UOI	0.04	1.29	2.03	0.18	0.13
Nozawa and Tamura	TIT	0.0093	1.39	2.62	0.23	0.131
Kawashima and Kawamura						
-	ST2	0.01	1.26	2.72	0.28	0.16
-	ST5	0.009	1.38	2.78	0.28	0.161
Datos experimentales: Lyn et al. [139] [138]						
	EXP	-	-	2.1	-	0.132
Este trabajo	S8A	0.03	0.4	2.01	0.22	0.139

el número de Strouhal (St).

Se observa que los valores obtenidos en el presente trabajo son de exactitud similar a los obtenidos por otros grupos con respecto a los datos experimentales. El número de Strouhal obtenido en el presente trabajo es ligeramente mayor que el experimental, pero similar al de otros trabajos hechos con LES. Las diferencias pueden deberse a las condiciones de contorno impuestas, leyes de pared o funciones *damping* empleadas, situaciones mencionadas en los trabajos existentes como posibles causas de desajustes en las simulaciones existentes sobre el caso.

En la figura C.15 se compara la velocidad axial media obtenida por los mismos autores del cuadro C.5 y también aparecen los datos experimentales. En la figura C.16 únicamente se comparan los datos experimentales con los obtenidos en este trabajo. En general, en estas dos figuras se puede observar que aguas arriba de la barra cuadrada, hay una mejor correlación entre los datos calculados. Sin embargo, aguas abajo, la disparidad en los resultados es evidente. La razón de este comportamiento se puede deber, como se comentó anteriormente, a la dependencia de los resultados con la malla y las condiciones de contorno empleadas por los diversos grupos. También hay que recalcar el hecho de que el flujo a la entrada del dominio tiene un comportamiento prácticamente laminar y la transición se da en las capas cortantes que se forman a los lados de la barra; esto es señalado y comprobado en los experimentos [139]. En la figura C.16 se observa que los resultados obtenidos en la simulación de este trabajo, concuerda razonablemente con los datos experimentales. En la figura C.17 se presentan las líneas de corriente reportadas en el experimento y las obtenidas en la simulación en un instante de tiempo. Se puede observar que el movimiento de desprendimiento de vórtices es capturado relativamente bien en la simulación, característica que se corrobora en la figuras C.18 y C.19, donde se presenta el contorno de vorticidad del flujo turbulento en dos planos del dominio.

En la figura C.20 se presentan los valores de la viscosidad turbulenta (ν_T) calculada por el modelo de Smagorinsky alrededor de la barra cuadrada en dos instantes de tiempo $t = \frac{1}{2}T$ y

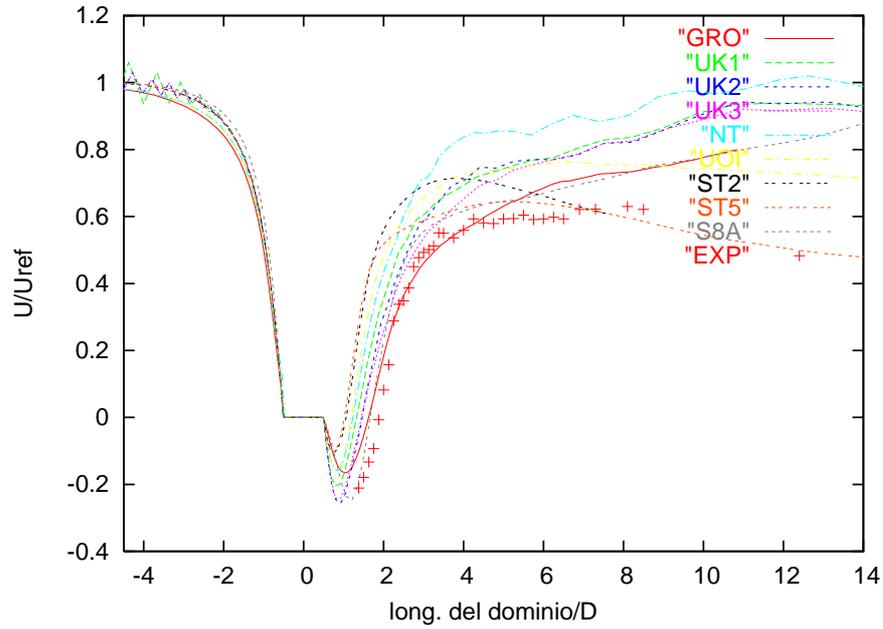


Fig. C.15: Comparación con datos experimentales y numéricos de la velocidad axial media en el eje central del dominio (ver etiquetas en la tabla C.5)

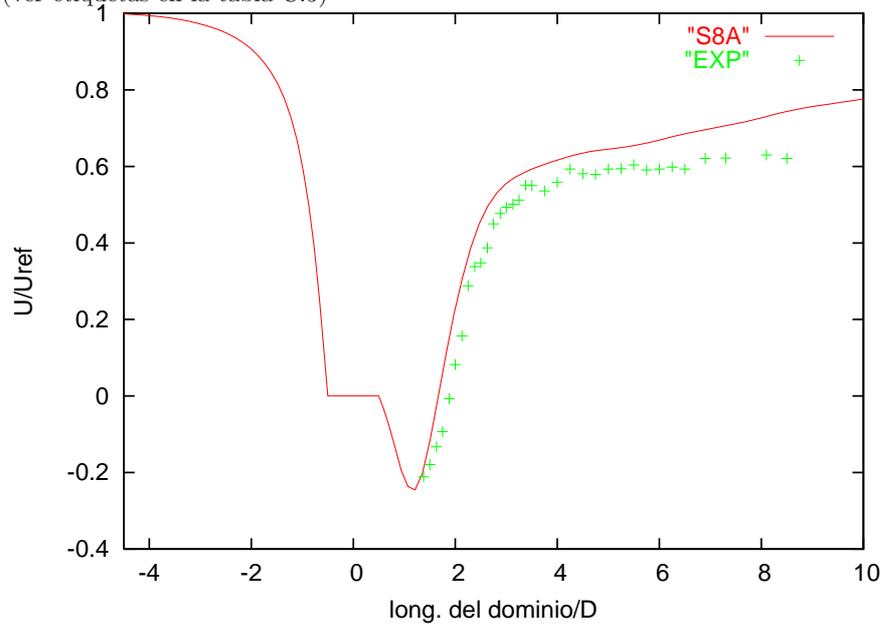


Fig. C.16: Comparación entre los datos experimentales y los obtenidos en este trabajo de la velocidad axial media en el eje central de dominio (ver etiquetas en el cuadro C.5)

$t = \frac{3}{4}T$, donde T es el periodo de desprendimiento de vórtices, en segundos. Se puede observar que v_T tiene mayor presencia en el área que coincide con la formación y el desprendimiento de vórtices. Lejos de esta sección, el flujo tiene un comportamiento prácticamente laminar.

La figura C.21 muestra los vectores de velocidad en 4 instantes o fases del periodo T alrededor de la barra cuadrada. El campo muestra la zona de recirculación inestable aguas abajo del cuerpo y captura el desprendimiento de vórtices debidos a los gradientes de velocidad en el flujo, aspecto

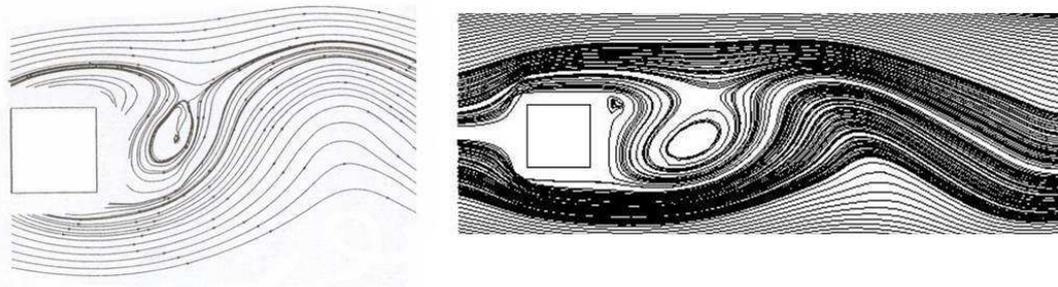


Fig. C.17: Líneas de corriente experimentales y numéricas

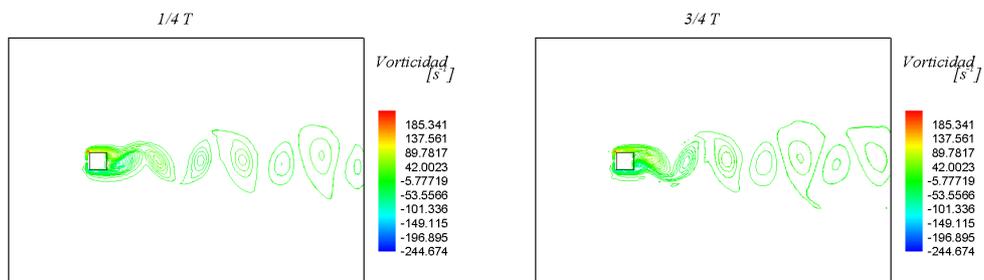


Fig. C.18: Contornos de vorticidad del flujo turbulento en dos instantes de tiempo (plano $y - z$); $T =$ periodo de desprendimiento de vórtices, en segundos

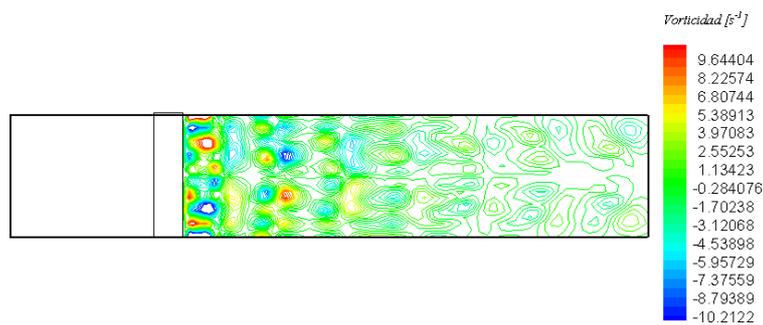


Fig. C.19: Contornos de vorticidad del flujo turbulento en un instante de tiempo (plano $x - y$)

que coincide con los contornos de vorticidad de la figura C.18.

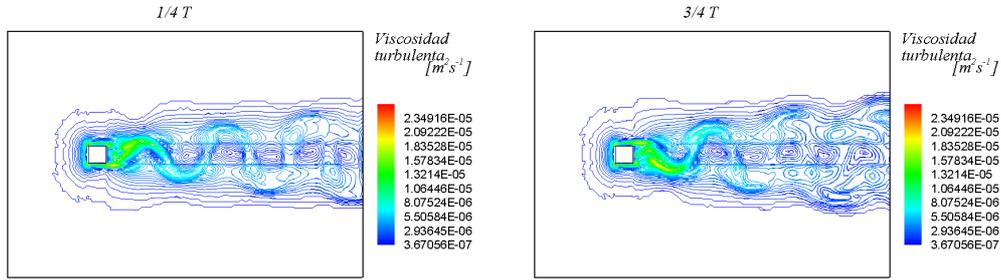


Fig. C.20: Viscosidad turbulenta ν_T alrededor del cilindro cuadrado en dos instantes de tiempo (plano y-z; T = periodo de desprendimiento de vórtices, en segundos)

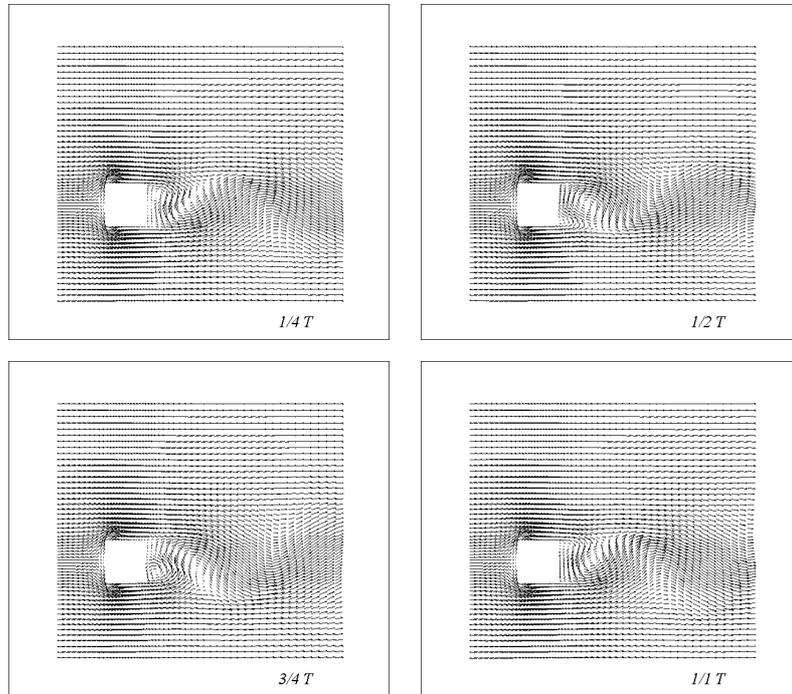


Fig. C.21: Vectores de velocidad en diferentes instantes de la simulación (T = periodo de desprendimiento de vórtices, en segundos)

C.4.3. Comparación de resultados entre LES y RANS

En esta sección se presentan resultados empleando ecuaciones promediadas (RANS), usando el modelo de turbulencia $k - \epsilon$, el cual viene incorporado en el código PHOENICS. Este modelo relaciona los esfuerzos de Reynolds con los gradientes de la velocidad media por medio de la viscosidad turbulenta. Cabe destacar que los esfuerzos de Reynolds se originan del promediado de las ecuaciones de Navier-Stokes, mientras que en LES, los esfuerzos τ_{ij}^s salen del filtrado de estas mismas ecuaciones. En este modelo, ν_T se define como [186]:

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (\text{C.6})$$

donde C_μ es una constante determinada experimentalmente ($= 0,09$). Los valores de k y ϵ se calculan a partir de ecuaciones de transporte.

En la figura C.22 se presenta la componente vertical (v) de la velocidad en los primeros segundos de la simulación, para las simulaciones empleando $k - \epsilon$ y LES. Los datos están recogidos a una distancia igual a $2D$ del origen coordenado del dominio. Se puede ver que con el modelo $k - \epsilon$, la amplitud de la señal va disminuyendo a medida que transcurre el tiempo, esto implica, que el movimiento de desprendimiento de vortices y las inestabilidades del flujo tienden a desaparecer, y la simulación dejará de ser transitoria en un instante dado. Por el contrario, el modelo de LES sigue capturando las inestabilidades. La velocidad axial media en el eje central del dominio, para ambos casos, se presenta en la figura C.23 y se comparan con los datos experimentales. Se puede observar que el modelo $k - \epsilon$ difiere considerablemente de los resultados, prediciendo una recuperación lenta de la velocidad axial aguas abajo del cilindro. Este comportamiento del modelo $k - \epsilon$ ha sido comprobado por otros trabajos similares [215], [73] y es debido a una excesiva producción de k (energía cinética turbulenta) por parte del modelo en la región de estancamiento, en la cara frontal del cilindro.

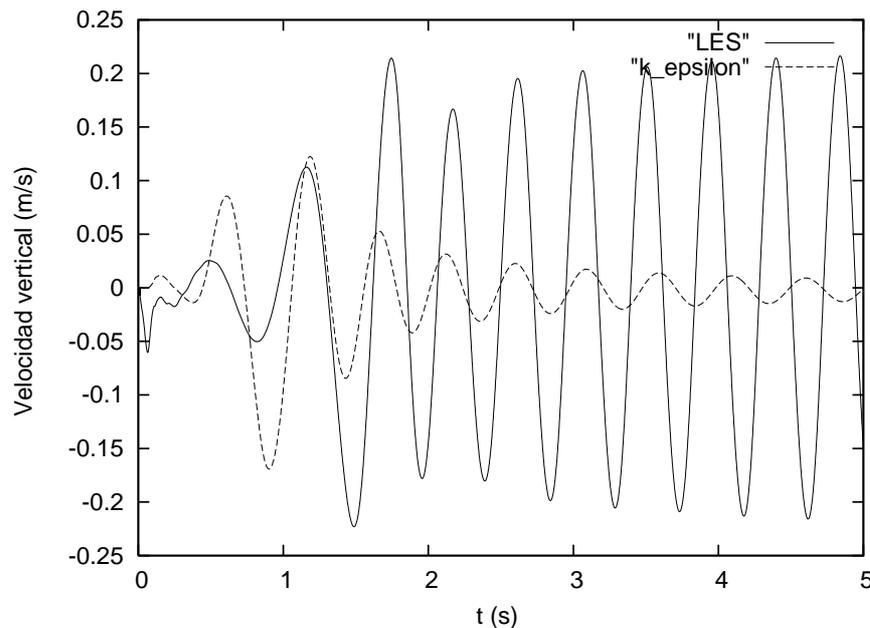


Fig. C.22: Comparación entre RANS (con $k - \epsilon$) y LES de la velocidad vertical en un punto a 2D del origen del dominio

C.4.4. Eficiencia de la simulación en paralelo

El comportamiento de un código paralelo se mide por el factor de *speed-up* definido por:

$$S_n = t_1/t_n \quad (C.7)$$

En la ecuación anterior, t_1 es el tiempo de ejecución necesario para resolver un problema determinado en un único procesador, t_n es el tiempo de ejecución de ese mismo problema utilizando n procesadores. Usualmente, S_n es menor que n (valor ideal) debido al esfuerzo computacional

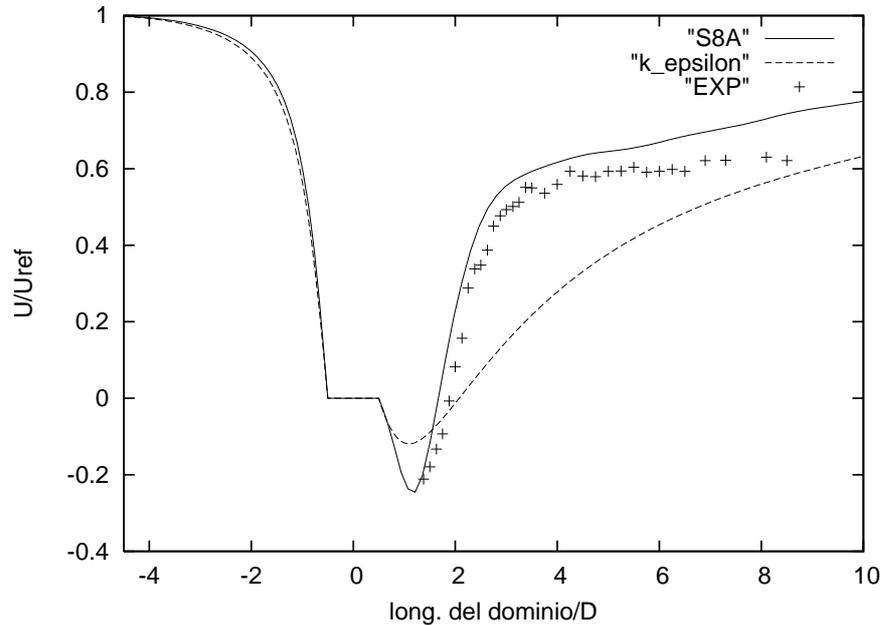


Fig. C.23: Velocidad axial media en el eje central del dominio empleando RANS (con $k - \epsilon$) y LES

extra que es necesario para realizar la paralelización, al tiempo empleado en la comunicación entre procesadores, o a posibles tiempos muertos por carga desigual de trabajo en los procesadores. Por ejemplo, para la malla 3D de $120 \times 102 \times 20$ nodos, utilizando un sólo procesador fueron necesarios aproximadamente 24 minutos por cada paso temporal, realizando 30 iteraciones por paso para obtener la convergencia. Al emplear 12 procesadores, este tiempo disminuye a alrededor de 3 minutos. Este comportamiento, se ve reflejado en la figura C.24. La diferencia en tiempo de cálculo a partir de 12 procesadores es mínima.

C.5. Conclusiones

En este documento se ha mostrado la implementación de la técnica de la Simulación de las Grandes Escalas a un código comercial y se ha aplicado a un flujo turbulento alrededor de un cuerpo de sección cuadrada (caso test). El flujo turbulento inestable y tridimensional ha sido simulado incorporando el modelo de Smagorinsky junto con esquemas de alto orden espacial y temporal al código PHOENICS. Al igual que otros autores han demostrado, el caso es muy sensible a factores tales como la densidad de la malla, las condiciones de contorno impuestas y a los esquemas de discretización empleados. En este trabajo se han seguido algunas de las recomendaciones vertidas por trabajos similares, aun así, es difícil valorar si los resultados obtenidos son de mayor o menor calidad con respecto a éstos. De la comparación con datos experimentales y numéricos se puede concluir que la implementación de el modelo y los esquemas produce resultados de razonable exactitud.

Se ha corroborado la superioridad en exactitud de LES sobre RANS, y es sabido que esta superioridad, es pagada en tiempo de cómputo. Aquí es donde la paralelización juega un rol importante ya que puede disminuir los tiempos de ejecución. Sin embargo, como ha quedado demostrado,

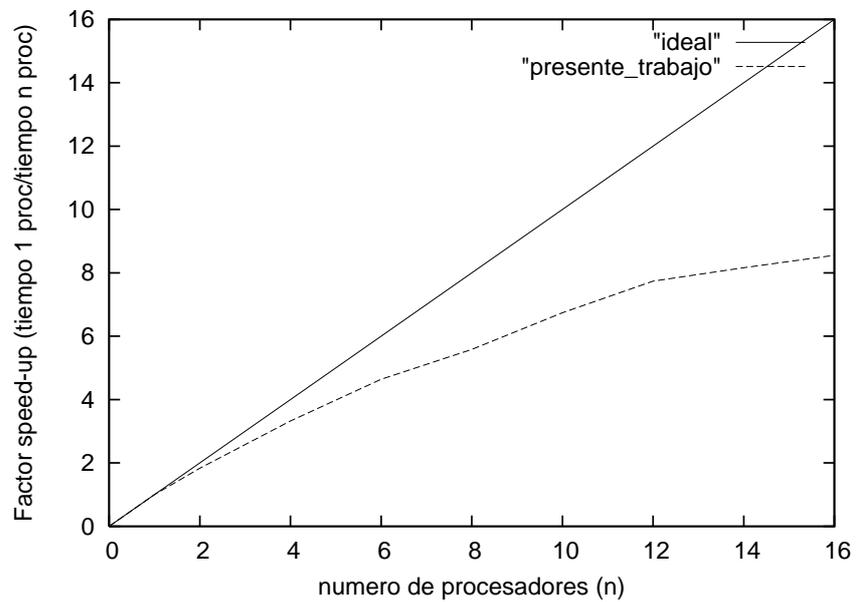


Fig. C.24: Comportamiento de la simulación paralelo: speed-up en función del número de procesadores, malla 120x102x20

esta disminución no es lineal, ya que hay que tomar en cuenta el tiempo que se emplea en la comunicación entre procesadores.

Apéndice D

RUN-1DL y subrutinas para la generación de tablas de flamelets

RUN-1DL es un programa capaz de modelar y predecir numéricamente fenómenos de flujo reactivo en una variedad de configuraciones unidimensionales. En el presente trabajo, se ha empleado la formulación de que resuelve las ecuaciones de flamelets laminares formuladas en espacio de la fracción de mezcla ξ (ecs. 4.26 y 4.27).

En este apéndice se presenta la estructura del código y su funcionamiento básico, así como su adaptación para la generación de las tablas de flamelets.

D.1. Estructura del programa

El programa RUN-1DL, creado para resolver problemas de flujo reactivo en configuraciones unidimensionales [221] [222], consta originalmente de un programa principal y alrededor de 100 subrutinas¹, todo ello escrito según el estándar *fortran 77*.

El usuario debe especificar al programa las características de problema a resolver, tales como condiciones de contorno y especies químicas, a través de una serie de ficheros de entrada (Sección D.2). Cada vez que se ejecuta el programa, la información provista por el usuario es interpretada y usada para resolver las Ecuaciones 4.26 y 4.27. Cuando se alcanza la convergencia en el proceso de solución, el programa la escribe en un fichero y se detiene.

Al código original se hicieron algunas modificaciones (ver Sección D.3) cuyo propósito final fue generar una tabla con los datos de composición y temperatura como función de la fracción de mezcla filtrada $\tilde{\xi}$, su varianza ξ_v^2 y la tasa de disipación $\tilde{\chi}$. Con estos tres parámetros, esta tabla puede consultarse posteriormente, e interpolada en su caso, por el programa de resolución de las ecuaciones de filtradas de Navier-Stokes.

¹el número exacto de subrutinas depende de la versión

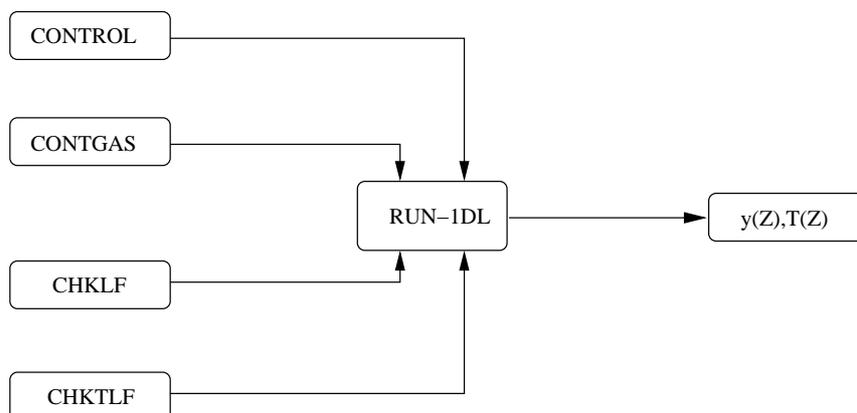


Fig. D.1: **Estructura del código.** Esquema del entorno de RUN-1DL cuando se trabaja con CHEMKIN.

D.2. Ficheros de entrada

Como todo código para resolver ecuaciones diferenciales, el programa RUN-1DL requiere de información que el usuario debe proveer a través de una serie de ficheros de entrada. En estos, se introducen los datos relativos a las condiciones de contorno, reacciones químicas y especies participantes, los parámetros de ejecución y opcionalmente, los datos de la solución de un caso similar previamente resuelto. En la figura D.1 se representa esquemáticamente la interacción de estos ficheros con el programa. Como resultado, RUN-1DL devuelve las composiciones y la temperatura en función de la fracción de mezcla instantánea.

Las características generales de los ficheros de entrada son las siguientes:

- + Ficheros de química: CHKLF y CHKTLF. Ambos son preparados previamente mediante el intérprete de CHEMKIN [108].
- + Fichero de continuación: CONTGAS. Es un fichero opcional que sirve para considerar soluciones previas como valores iniciales de una nueva ejecución del programa. Su uso disminuye sensiblemente los tiempos de cálculo.
- + Fichero de control: CONTROL, que indica al programa los parámetros de la simulación tales como las condiciones de contorno y el método de solución, entre otros.

A continuación se explica con más detalle la función de cada uno de estos ficheros.

D.2.1. Ficheros de química

Para introducir a RUN-1DL las características de la química con la que se lleva a cabo la simulación, es necesario introducir una serie de archivos que contienen esta información. RUN-1DL admite dos tipos de ficheros para este fin: los que resultan de ejecutar el programa PRE-CTR, programado por los mismos autores que RUN-1DL, y los que son generados mediante el uso de CHEMKIN, un código desarrollado por los laboratorios SANDIA [108]. Esta última opción es la empleada en el presente trabajo.

Por tanto, mediante intérpretes que están contenidos en el paquete CHEMKIN, se generan los ficheros CHKLF y CHKTLF que se encargan de introducir a RUN-1DL los datos relativos a la química (termodinámicos, de transporte y de tasa de reacción). Los datos de entrada para crear estos archivos de enlace son bases de datos con formato propio de CHEMKIN conteniendo valores termodinámicos de todas las especies involucradas, datos de transporte de dichas especies y las reacciones químicas del mecanismo elegido, con sus respectivos parámetros para el cálculo de las constantes de reacción, es decir, el factor preexponencial, la energía de activación y el exponente de la temperatura.

D.2.2. Fichero de continuación

El coste de la solución numérica de un problema de combustión, medido en unidades de tiempo de CPU, se puede reducir de gran manera si el problema en cuestión es similar a otro cuya solución numérica se ha determinado previamente. En RUN-1DL, una solución previa se puede utilizar como una estimación inicial para un nuevo problema a tratar; si este es el caso se dice que se está empleando el método de continuación. La única alternativa al uso de este método es empezar la simulación con perfiles estimados para las variables dependientes.

Si se utiliza el método de continuación, el usuario tiene que proveer la solución previamente calculada para un problema similar. Esta información se suministra a través del archivo de continuación, denominado CONTGAS. Este fichero posee un formato específico y puede editarse por el usuario con el fin de modificar los datos y adaptarlos a una nueva simulación, por ejemplo, agregando puntos en la malla.

D.2.3. Fichero de control

El funcionamiento en general del programa RUN-1DL puede controlarse mediante el fichero CONTROL donde, entre otros parámetros, se especifica el método de solución, la precisión y las condiciones de contorno.

Los datos de control se especifican mediante palabras clave seguidas de los parámetros correspondientes, que deberían estar entre las columnas 17 y 72 para poder ser leídos por el programa principal. Entre los parámetros más importantes que se especifican se encuentran:

- **METHOD.** Con esta palabra clave se especifica el método de solución para las ecuaciones diferenciales. Las opciones que se pueden elegir son NEWTONS, NEWTONT, EULERT o PISO.
- **BOUNDARY LEFT / BOUNDARY RIGHT.** Se emplea para especificar el tipo de condiciones de contorno que se emplearían en el cálculo. Se puede especificar, por ejemplo, MASS FRACTIONS, que indica que se especificarían las fracciones másicas de las especies químicas, o ZERO GRADIENTS que indica una condición de gradientes nulos en la entrada.
- **TOLERANCE.** Con esta línea se suministra la precisión deseada para la solución, en términos absolutos y relativos, tanto para cálculos estacionarios como para transitorios.
- **CONTINUATION.** Eligiendo .TRUE. o .FALSE. se especifica si se desea partir de una solución previa.
- **PRESSURE.** Para especificar la presión (en pascales).

- GRIDPOINTS. Con este parámetro se indica el número de puntos de la malla computacional.
- LEFT STATE / RIGHT STATE. Mediante estas etiquetas se introducen las condiciones de contorno del problema, determinadas por las características de las corrientes del sistema. Mediante las letras T, X o Y se indica si el valor especificado corresponde, respectivamente, a una temperatura, fracción molar o fracción másica.
- PREMIXED FLAME Mediante las opciones .TRUE. o .FALSE. se activa o desactiva los módulos correspondientes al cálculo de llamas premezcladas.
- DIFFUSION FLAME BEGIN. Etiquetas que sirven para especificar algunos parámetros, entre el BEGIN y el END, cuando el tipo de llama que se resuelve es no premezclada. Entre los parámetros a especificar en esta sección se encuentran:

MFSPACE para resolver el problema en el espacio de fracción de mezcla;

FROMSCRATCH si el cálculo inicia desde cero;

INERT cuando sólo se resuelve la mezcla y no hay reacción; y

TEMPMAX para especificar una estimación de la temperatura máxima.

- POSITIVITY. Con las opciones .TRUE. o .FALSE. se decide si se permiten valores negativos en las fracciones másicas durante las iteraciones.
- CHEMKIN. Especifica que los parámetros de la química serían aportados mediante ficheros generados por CHEMKIN.

D.3. Adaptaciones al programa original

Con el fin de tabular los datos para su posterior lectura por parte del solver *CFD*, se han realizado una serie de modificaciones al programa original.

RUN-IDL es un código que determina la composición y la temperatura en configuraciones unidimensionales, en este caso, en función de la fracción de mezcla ξ , dada una tasa de disipación (ecuaciones de flamelets laminares 4.26 y 4.27) que el usuario debe especificar manualmente en la subrutina USERMF. Sin embargo, el objetivo final es tabular la composición, densidad y temperatura en función de variables filtradas $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$ (flujo turbulento), de acuerdo con lo especificado en las correspondientes secciones de esta tesis..

Por tanto, entre las adaptaciones principales se encuentra la transformación del código principal de RUN-IDL en una subrutina y de este modo, transferir el control a un nuevo fichero principal desde el cual, y con el uso de bloques COMMON, se controlan y se accede a parámetros y variables tales como la tasa de disipación y el número de veces que se ejecuta el código, y la integración posterior de las perfiles laminares con las funciones de densidad de probabilidad. Es esquema de la estructura del código con las adaptaciones se muestra en la figura D.2.

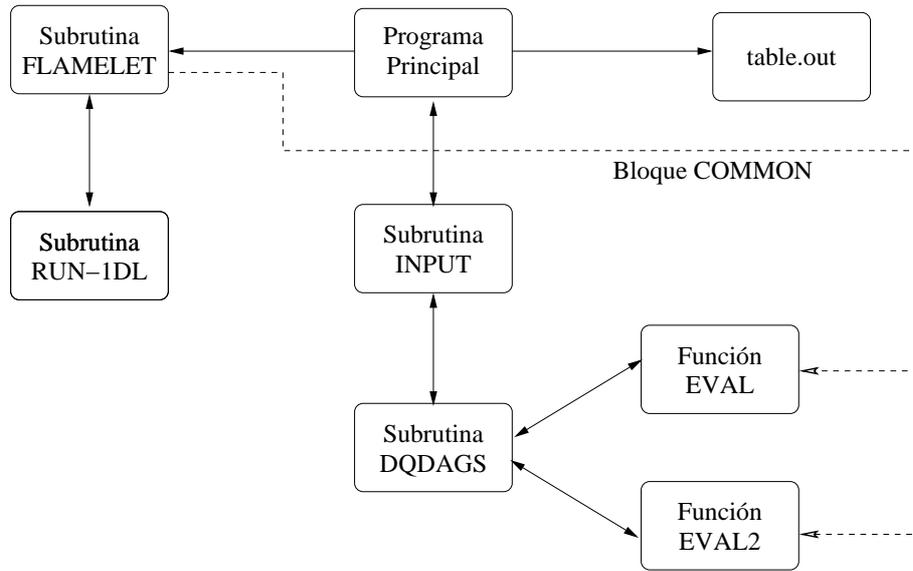


Fig. D.2: **Estructura de la adaptación de RUN-1DL.** Diagrama del programa para la generación de las tablas de interpolación.

El programa de control principal llama a la subrutina FLAMELET donde RUN-1DL (convertido en subrutina) es llamado repetidamente, ajustando los valores para distintas tasas de disipación; los resultados son almacenados en un *array* para su posterior uso a través de un bloque COMMON.

En el fichero principal se especifica también los rangos de tabulación para $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$ de acuerdo a los valores esperados en la simulación de *LES*. Con cada punto especificado por estas tres variables, el programa llama a la subrutina *INPUT*, desde la cual se llama a la subrutina DQDAGS [169] encargada de la integración. Las funciones $\tilde{P}^s(\xi)$ (distribución beta) y $\tilde{P}^s(\chi^*)$ (distribución lognormal) se construyen en las subrutinas EVAL y EVAL2, respectivamente.

La integración comienza una vez completado el proceso de generación de flamelets laminares por RUN-1DL, conforme se realiza ésta, el programa principal va volcando el resultado a un archivo externo (table.out). Los valores quedan caracterizados por $\tilde{\xi}$, ξ_v^2 y $\tilde{\chi}$, junto a las cuales se tabulan las composiciones, densidad y temperatura correspondientes.

Apéndice E

Mecanismo reducido de Smooke

En este apartado se muestra el mecanismo *skeletal* de Smooke [242] [16] para la combustión de metano, el cual, consta de 16 especies químicas: CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , H , H_2 , HO_2 , H_2O_2 , O , OH , CH_3 , CHO , CH_2O , CH_3O , CO , N_2 .

Las especies participan en las 35 reacciones que se muestran en la tabla E.1.

Tabla E.1: **Mecanismo reducido de Smooke**. Reacciones y valores para las constantes de reacción. Las unidades son kg, m, s, kmol, cal y K.

Reacción	A_r	b_r	E_r
$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	2.000E+14	0.00	16800.00
$OH + O \rightleftharpoons H + O_2$	1.575E+13	0.00	690.00
$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	1.800E+10	1.00	8826.00
$OH + H \rightleftharpoons O + H_2$	8.000E+09	1.00	6760.00
$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	1.170E+09	1.30	3626.00
$H_2O + H \rightleftharpoons H_2 + OH$	5.090E+09	1.30	18588.00
$OH + OH \rightleftharpoons O + H_2O$	6.000E+08	1.30	0.00
$O + H_2O \rightleftharpoons OH + OH$	5.900E+09	1.30	17029.00
$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	2.300E+18	-0.80	0.00
$H + HO_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1.500E+14	0.00	1004.00
$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	2.500E+13	0.00	700.00
$OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	2.000E+13	0.00	1000.00
$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	1.510E+07	1.30	-758.00
$CO_2 + H \rightleftharpoons CO + OH$	1.570E+09	1.30	22337.00
$CH_4(+M) \rightleftharpoons CH_3 + H(+M)$	6.300E+14	0.00	104000.00
$CH_3 + H(+M) \rightleftharpoons CH_4(+M)$	5.200E+12	0.00	-1310.00
$CH_4 + H \rightleftharpoons CH_3 + H_2$	2.200E+04	3.00	8750.00
$CH_3 + H_2 \rightleftharpoons CH_4 + H$	9.570E+02	3.00	8750.00
$CH_4 + OH \rightleftharpoons CH_3 + H_2O$	1.600E+06	2.10	2460.00
$CH_3 + H_2O \rightleftharpoons CH_4 + OH$	3.020E+05	2.10	17422.00

Tabla E.1: **Mecanismo de Smooke**. Reacciones y valores para las constantes de reacción. Las unidades son kg, m, s, kmol, cal y K. (continuación)

Reacción	A_r	b_r	E_r
$CH_3 + O \rightleftharpoons CH_2O + H$	6.800E+13	0.00	0.00
$CH_2O + H \rightleftharpoons CHO + H_2$	2.500E+13	0.00	3991.00
$CH_2O + OH \rightleftharpoons CHO + H_2O$	3.000E+13	0.00	1195.00
$CHO + H \rightleftharpoons CO + H_2$	4.000E+13	0.00	0.00
$CHO + M \rightleftharpoons CO + H + M$	1.600E+14	0.00	14700.00
$CH_3 + O_2 \rightleftharpoons CH_3O + O$	7.000E+12	0.00	25652.00
$CH_3O + H \rightleftharpoons CH_2O + H_2$	2.000E+13	0.00	0.00
$CH_3O + M \rightleftharpoons CH_2O + H + M$	2.400E+13	0.00	28812.00
$HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	2.000E+12	0.00	0.00
$H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	1.300E+17	0.00	45500.00
$OH + OH + M \rightleftharpoons H_2O_2 + M$	9.860E+14	0.00	-5070.00
$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	1.000E+13	0.00	1800.00
$H_2O + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + OH$	2.860E+13	0.00	32790.00
$OH + H + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.200E+22	-2.00	0.00
$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	1.800E+18	-1.00	0.00

Lista de tablas

3.1. Funciones de filtro en una dimensión empleadas en <i>LES</i> en espacio físico y en espacio de Fourier [202, 224]	26
4.1. Clasificación de los modelos de combustión en términos de la química y el mezclado (adaptada de [185])	48
6.1. Parámetros de las corrientes de entrada para las llamas C, D y E	89
6.2. llamas C, D y E. Ecuaciones resueltas mediante <i>LES</i>	97
6.3. Tiempo de cómputo para las simulaciones principales	104
C.1. Principales parámetros del experimento de Lyn <i>et al.</i> ([139] [138])	182
C.2. Parámetros integrales determinados en simulaciones 2D para 3 diferentes mallas y mismo tamaño de paso temporal Δt	190
C.3. Parámetros integrales determinados en simulaciones 2D para diferentes tamaños de paso temporal y mallas	191
C.4. Parámetros integrales determinados en simulaciones 2D para diferentes condiciones de contorno en las paredes del cilindro en la malla B	195
C.5. Resultados y comparación de parámetros integrales. Las etiquetas son las mismas que las usadas en [215, 216, 217]	196
E.1. Mecanismo reducido de Smooke. Reacciones y valores para las constantes de reacción. Las unidades son kg, m, s, kmol, cal y K.	209
E.1. Mecanismo de Smooke. Reacciones y valores para las constantes de reacción. Las unidades son kg, m, s, kmol, cal y K. (continuación)	210

Lista de figuras

1.1. Tratamiento y nivel de aproximación de las técnicas de <i>CFD</i>	3
1.2. Complejidad y aumento de recursos computacionales en el modelado de flujos turbulentos reactivos. Los ejes pueden considerarse en escala logarítmica [35].	6
2.1. Esquema representativo de un sistema de combustión con dos entradas: oxidante (a) y combustible (b). Los gases calientes producto de la combustión salen por (c).	18
3.1. Cascada de energía cinética (en escala logarítmica) de los torbellinos de grandes escalas a los de pequeña escala. Eje vertical: energía cinética. Eje horizontal: número de onda.	24
3.2. División del espectro de energía en <i>LES</i>	25
3.3. Relación entre esfuerzos <i>test</i> T_{ij}^s y esfuerzos asociados con la malla τ_{ij}^s . Eje vertical: energía cinética. Eje horizontal: numero de onda.	34
4.1. Estructura geométrica en las llamas premezclada y no premezclada	47
4.2. Diagrama para la clasificación de la reacción química en sistemas turbulentos no premezclados	49
4.3. Transformación de coordenadas globales a locales en la formulación para la deducción de la ecuación de flamelets en llamas no premezcladas	53
4.4. Aplicación del concepto de flamelet laminar para llamas turbulentas no premezcladas	54
4.5. Representación esquemática del modelo <i>LEM</i> en su formulación original (izquierda) y formulado como modelo submalla, <i>S-LEM</i> (derecha).	61
4.6. Representación esquemática del proceso de <i>triplet map</i> . a: Selección aleatoria de posición y tamaño (<i>l</i>) del torbellino; b: alteración ocasionada por el <i>triplet map</i> ; c: la difusión molecular suaviza las discontinuidades del gradiente del escalar.	63
5.1. Representación de un sistema discretizado con una malla estructurada en volúmenes finitos.	71
5.2. Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.	71
5.3. Diagrama esquemático del filtrado resultante en la discretización de un campo de velocidad unidimensional de acuerdo a lo propuesto por Schumann [233].	74
5.4. Esquema del acoplamiento entre los cálculos de modelo flamelet, su integración y acoplamiento con <i>LES</i>	80

5.5. Esquema del acoplamiento entre <i>S-LEM</i> y <i>LES</i> . Cada proceso involucrado en el acoplamiento evoluciona numéricamente de acuerdo a su propia escala de tiempo . . .	81
5.6. Ilustración esquemática del algoritmo de splicing. En cada Δt_{LES} , elementos del subdominio de 1D son copiados entre celdas vecinas para contabilizar el transporte de las grandes escalas. Las flechas indican las componentes del flujo convectivo . . .	83
6.1. Llamas C, D y E. Diagrama esquemático de las corrientes de entrada del quemador.	89
6.2. Imagen real de la llama pilotada de difusión (fuente: [173]).	90
6.3. Dominio computacional empleado e índice de calidad en las tres configuraciones. . .	92
6.4. Llamas C, D y E; <i>LES</i> (Ecuación k^s) y flamelets. Índice de calidad de la malla para las tres configuraciones estudiadas.	93
6.5. Llama D; <i>LES</i> (Smagorinsky) y flamelets. Perfiles de las componentes axial y radial de la velocidad (media y <i>rms</i>), fracción de mezcla y temperatura (media) en el eje central producidos por los esquemas implícitos Euler (primer orden) y Adam-Moulton (tercer orden).	94
6.6. Llama D; <i>LES</i> y flamelets. Perfiles de las componentes axial y radial de la velocidad (media y <i>rms</i>), fracción de mezcla y temperatura (media) en el eje central producidos por diferentes modelos submalla de <i>LES</i>	95
6.7. Llama D; <i>LES</i> y flamelets. Perfiles axiales de la energía cinética turbulenta, total y submalla, en el eje central de la llama para los modelos submalla evaluados. . . .	96
6.8. Distribución de la temperatura en la <i>LUT</i> generada por el modelo de flamelets. . .	97
6.9. Llama D; <i>LES</i> (Ecuación k^s) y flamelets. Condiciones de contorno generadas mediante tres procedimientos: (1) fluctuaciones correlacionadas, (2) fluctuaciones aleatorias y (3) con tres longitudes de desarrollo ($2D_{jet}$, $4D_{jet}$ y $8D_{jet}$) aguas arriba de la boquilla.	98
6.10. Llama D; <i>LES</i> (Ecuación k^s) y flamelets. Perfiles de las componentes axial y radial de de la velocidad (media y <i>rms</i>), fracción de mezcla y temperatura (media) en el eje central producidos por la imposición de condiciones de contorno por fluctuaciones aleatorias y correlacionadas espacialmente en la entrada del dominio.	99
6.11. Llamas C, D y E; <i>LES</i> (Ecuación k^s) y flamelets. Comparación de las condiciones de contorno generadas artificialmente con los perfiles experimentales.	100
6.12. Llamas C, D y E; <i>LES</i> (Ecuación k^s), flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo. Ratio de escalas típico entre el tamaño de filtro en <i>LES</i> , Δ , y la escala de Kolmogorov, η . Los dominios submalla unidimensionales de <i>S-LEM</i> están discretizado en 108 elementos en las tres llamas.	101
6.13. Llama D; <i>LES</i> (Ecuación k^s), flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo. Perfiles radiales de la fracción de mezcla media y <i>rms</i> en tres estaciones axiales determinadas por volúmenes finitos y <i>S-LEM</i> (sin corrección de alto orden e incorporando ésta al algoritmo de <i>splicing</i>).	103
6.14. Campo de escalares submalla de <i>S-LEM</i> . Los escalares son inicializados a partir de una distribución uniforme extraída de la solución del flujo con el modelo de flamelets. El modelo altera esta distribución desde el primer paso temporal.	105

7.1. LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Esquema de las simulaciones.	108
7.2. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Distribución instantánea de la velocidad axial (izquierda) y temperatura (derecha) determinada mediante LES y flamelets.	109
7.3. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Distribución instantánea de la fracción de mezcla determinada mediante LES (izquierda) y S-LEM (derecha).	110
7.4. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles de las velocidades axial y radial media y rms en el eje central.	111
7.5. Llama D; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Fluctuaciones medias y rms en las velocidades axial (u) y radial (v) en distintas estaciones axiales.	112
7.6. Llama E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Fluctuaciones medias y rms en las velocidades axial (u) y radial (v) en distintas estaciones axiales.	113
7.7. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles de la fracción de mezcla y temperatura medias y rms en el eje central.	114
7.8. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles radiales de la fracción de mezcla media y rms en distintas estaciones axiales determinadas por LES y S-LEM.	115
7.9. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles radiales de la temperatura media y rms en distintas estaciones axiales determinadas por LES y S-LEM.	116
7.10. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Distribución de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO en el eje central.	117
7.11. Llama C; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en varias estaciones axiales.	118
7.12. Llama D; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en varias estaciones axiales.	119
7.13. Llama E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en varias estaciones axiales.	120
7.14. Llama C; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.	121
7.15. Llama D; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.	122
7.16. Llama E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , H_2 , CO_2 y CO medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.	123
8.1. LES y S-LEM reactivo. Esquema de las simulaciones.	126
8.2. Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo. Distribución instantánea de la velocidad axial.	127

8.3. Llamas C, D y E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución instantánea de la fracción de mezcla.	127
8.4. Llamas C, D y E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución instantánea de la temperatura.	128
8.5. Llama D; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución instantánea de la zona de reacción química determinada por el mecanismo químico. La línea sólida muestra la localización de la fracción de mezcla estequiométrica	128
8.6. Llamas C, D y E. <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Perfiles de las velocidades axial y radial media y <i>rms</i> en el eje central.	129
8.7. Llama D; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Fluctuaciones medias y <i>rms</i> en las velocidades axial (<i>u</i>) y radial (<i>v</i>) en distintas estaciones axiales.	130
8.8. Llama E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Fluctuaciones medias y <i>rms</i> en las velocidades axial (<i>u</i>) y radial (<i>v</i>) en distintas estaciones axiales.	131
8.9. Llamas C, D y E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Perfiles de la fracción de mezcla y temperatura medias y <i>rms</i> en el eje central.	132
8.10. Llamas C, D y E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Perfiles radiales de la fracción de mezcla media y <i>rms</i> en distintas estaciones axiales.	133
8.11. Llamas C, D y E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Perfiles radiales de la temperatura media y <i>rms</i> en distintas estaciones axiales.	134
8.12. Llamas C, D y E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 en el eje central.	135
8.13. Llama C; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , y CO_2 medios en varias estaciones axiales.	136
8.14. Llama D; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , y CO_2 medios en varias estaciones axiales.	137
8.15. Llama E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Distribución radial de los escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O , y CO_2 medios en varias estaciones axiales.	138
8.16. Llama C; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.	139
8.17. Llama D; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.	140
8.18. Llama E; <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> reactivo. Temperatura y escalares químicos CH_4 , O_2 , H_2O y CO_2 medios en espacio de la fracción de mezcla en tres estaciones axiales.	141
9.1. Llamas C, D y E; <i>LES</i> , flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo Perfiles radiales de la varianza y tasa de disipación de ξ en distintas estaciones axiales determinadas por <i>LES</i> y <i>S-LEM</i> . Las cantidades están promediadas en el tiempo. [a] hipótesis de equilibrio local, [b] ecuación para ξ_v^2 , [c] ecuación para $\tilde{\xi}^2$, [d] <i>S-LEM</i>	145
9.2. Llama D; <i>LES</i> , flamelets y <i>S-LEM</i> no reactivo. Distribución instantánea de la disipación para los cuatro modelos. [a] hipótesis de equilibrio local, [b] ecuación para ξ_v^2 , [c] ecuación para $\tilde{\xi}^2$, [d] <i>S-LEM</i>	146

9.3. Llama D; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Perfiles radiales de las medias temporales de la tasa de disipación promediadas de forma condicionada a los valores de la fracción de mezcla filtrada en tres posiciones axiales. [a] hipótesis de equilibrio local, [b] ecuación para ξ_v^2 , [c] ecuación para $\tilde{\xi}^2$, [d] <i>S-LEM</i>	147
9.4. Llamas C, D y E; LES, flamelets y S-LEM no reactivo. Funciones de densidad de probabilidad (PDFs) de la tasa de disipación condicionadas al valor de la fracción de mezcla estequiométrica.	148
9.5. Llama C; LES y S-LEM reactivo. Dispersión de los escalares químicos, experimentales y en el dominio submalla, en tres posiciones axiales.	151
9.6. Llama D; LES y S-LEM reactivo. Dispersión de escalares químicos, experimentales y en el dominio submalla, en tres posiciones axiales.	152
9.7. Llama E; LES y S-LEM reactivo. Dispersión de escalares químicos, experimentales y en el dominio submalla, en tres posiciones axiales.	153
9.8. Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo. Perfiles radiales de la tasa de disipación promediada de forma condicionada a los valores de la fracción de mezcla en tres posiciones axiales. Los valores numéricos de ξ y χ han sido extraídos del dominio submalla de <i>S-LEM</i>	154
9.9. Llama D; LES, flamelets y S-LEM reactivo. Perfiles radiales de la tasa de disipación promediada de forma condicionada a los valores de ξ , para la fracción de mezcla y el combustible, en tres posiciones axiales. La línea vertical discontinua localiza el valor estequiométrico de la fracción de mezcla.	155
9.10. Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo. Funciones de densidad de probabilidad (PDFs) de la tasa de disipación condicionadas al valor de la fracción de mezcla estequiométrica.	156
9.11. Llamas C, D y E; LES y S-LEM reactivo. Especies químicas doblemente condicionadas en el punto estequiométrico con ξ_{st} y χ_{st}	157
A.1. Diagrama esquemático de celdas para la discretización.	166
B.1. Convección unidimensional de un escalar usando distintos números de elementos en el subdominio de <i>S-LEM</i>	172
B.2. Convección unidimensional de un escalar para distintos valores de los parámetros de mezclado de N_η , C_λ y S_c	174
B.3. Esquema del caso test para la convección bidimensional	175
B.4. Convección en 2D de un escalar en volúmenes finitos y <i>S-LEM</i>	175
B.5. Notación esquemática para la implementación de esquemas de alto orden para la convección	176
B.6. Convección bidimensional de un escalar usando distintos esquemas de discretización	177
B.7. Contornos 2D para un escalar transportado y su respectiva varianza submalla determinados mediante <i>S-LEM</i> para dos valores de S_c con un esquema de alto orden	178
B.8. Fracción de mezcla media en tres estaciones axiales de la llama D para las predicciones de volúmenes finitos y <i>S-LEM</i>	179

C.1. Dominio y geometría del flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado	184
C.2. Efecto en la velocidad vertical v de los esquemas de discretización espacial (arriba), temporal (en medio) y modelo de Smagorinsky (abajo) en el punto 2D	186
C.3. Efecto de los esquemas de discretización en la velocidad axial media $\langle w \rangle$ sobre el eje central del dominio para diferentes esquemas de discretización con el modelo de Smagorinsky desactivado (izquierda) y activado (derecha).	187
C.4. Efecto de los esquemas de discretización en la velocidad axial media $\langle w \rangle$ sobre el eje central del dominio incorporando el modelo estándar de Smagorinsky, (en la derecha se hace un <i>zoom</i> en la zona de recirculación)	187
C.5. Patrón del flujo capturado a través del escalar ξ incorporando los esquemas numéricos analizados y el modelo de Smagorinsky	188
C.6. Coeficiente de arrastre medio, $\langle C_D \rangle$, (izquierda) y número de Strouhal, St , (derecha) determinado con los distintos esquemas de discretización empleados	189
C.7. Velocidad axial media $\langle w \rangle$ en el eje central del dominio para el flujo turbulento alrededor de un cilindro cuadrado. En el lado izquierdo se emplean cuanto mallas distintas; en el derecho, el mismo número de nodos (200x140) pero con espaciado diferente en cilindro (malla A: 10x10; malla B:20x20; malla C: 30x30)	189
C.8. Patrón del flujo capturado a través del escalar ξ empleando 200x140 nodos y diferente resolución en área de cilindro(malla A: 10x10; malla B:20x20; malla C: 30x30)	189
C.9. Velocidad media axial $\langle w \rangle$ (izquierda) y velocidad radial media $\langle v \rangle$ (derecha) sobre el eje central del dominio para distintos tamaños de paso temporal en malla A.	192
C.10. Velocidad media axial $\langle w \rangle$ (izquierda) y magnitud de su fluctuación w_{rms} (derecha) sobre la pared superior del cilindro ($\{z, y\} = \{0,5D, 0,5D\}$) para diferentes tamaños de paso temporal (malla B).	192
C.11. Patrón del flujo capturado a través del escalar ξ para diferentes mallas y pasos temporales.	193
C.12. Viscosidad turbulenta determinada en los nodos adyacentes a las paredes superior e inferior del cilindro cuadrado para diferentes condiciones de contorno(malla B).	194
C.13. Viscosidad turbulenta determinada sobre las paredes inferior (izquierda) y superior (derecha) del cilindro cuadrado para diferentes condiciones de contorno (malla B).	194
C.14. Velocidad media axial $\langle w \rangle$ (izquierda) y magnitud de su fluctuación w_{rms} (derecha) sobre la pared superior del cilindro ($\{z, y\} = \{0,5D, 0,5D\}$) para diferentes condiciones de contorno en las paredes del cilindro (malla B).	195
C.15. Comparación con datos experimentales y numéricos de la velocidad axial media en el eje central del dominio (ver etiquetas en la tabla C.5)	197
C.16. Comparación entre los datos experimentales y los obtenidos en este trabajo de la velocidad axial media en el eje central de dominio (ver etiquetas en el cuadro C.5)	197
C.17. Líneas de corriente experimentales y numéricas	198
C.18. Contornos de vorticidad del flujo turbulento en dos instantes de tiempo (plano $y - z$); $T =$ periodo de desprendimiento de vórtices, en segundos	198
C.19. Contornos de vorticidad del flujo turbulento en un instante de tiempo (plano $x - y$)	198

C.20. Viscosidad turbulenta ν_T alrededor del cilindro cuadrado en dos instantes de tiempo (plano y-z; $T =$ periodo de desprendimiento de vórtices, en segundos)	199
C.21. Vectores de velocidad en diferentes instantes de la simulación ($T =$ periodo de desprendimiento de vortices, en segundos)	199
C.22. Comparación entre RANS (con $k - \epsilon$) y LES de la velocidad vertical en un punto a 2D del origen del dominio	200
C.23. Velocidad axial media en el eje central del dominio empleando RANS (con $k - \epsilon$) y LES .	201
C.24. Comportamiento de la simulación paralelo: speed-up en función del número de procesadores, malla 120x102x20	202
D.1. Estructura del código. Esquema del entorno de RUN-1DL cuando se trabaja con CHEMKIN.	204
D.2. Estructura de la adaptación de RUN-1DL. Diagrama del programa para la generación de las tablas de interpolación.	207

Bibliografía

- [1] International Energy Agency. Key world energy statistics 2003, 2003. 1
- [2] K. Akselvoll and P. Moin. Large-eddy simulation of turbulent confined coannular jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 315:387–411, 1996. 23
- [3] R. Aris. *Vectors, tensors and the basic equations of fluid Mechanics*. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. Prentice Hall, 1962. 13
- [4] X.S. Bai and L. Fuchs. Laminar flamelet structure at low and vanishing scalar dissipation rate. *Combustion and Flame*, 120:285–300, 2000. 56
- [5] J. Baker, H.L. Walker, and X. Cai. A study of the dispersion and transport of reactive pollutants in and above street canyons, a large eddy simulation. *Submitted to Atmospheric Environment*, 2004. 23
- [6] J. Bardina, J.H. Ferziger, and W.C. Reynolds. Improved subgrid scale model for large eddy simulation. *AIAA*, 80:1357, 1980. 37
- [7] J. Bardina, J.H. Ferziger, and W.C. Reynolds. Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows, 1983. 37
- [8] R. Barlow and A. Karpetis. Scalar length scales and spatial averaging effects in turbulent piloted methane/air jet flames. In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 673–680, Pittsburgh, 2005. 8, 88, 90
- [9] R.S. Barlow. Private communication, 2008. 144
- [10] R.S. Barlow and J.H. Frank. Effects of turbulence on species mass fraction in methane/air jet flames. In The Combustion Institute, editor, *27th Symposium (International) on Combustion*, pages 1087–1095, Pittsburgh, 1998. 8, 88, 89
- [11] G.K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 2000. 13
- [12] R.W. Bilger. The structure of turbulent nonpremixed flames. In The Combustion Institute, editor, *22th Symposium (International) on Combustion*, pages 475–488, Pittsburgh, 1988. 19
- [13] R.W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent reacting flows. *Physics of Fluids, A* 5:436–444, 1993. 5, 48, 50

- [14] R.W. Bilger. The future for energy from the combustion of fossil fuels. In *5th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*, pages 617–23, Lisbon, Portugal, July 1999. 1
- [15] R.W. Bilger. Future progress in turbulent combustion research. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26:367–380, 2000. 2
- [16] R.W. Bilger, M.B. Esler, and S.H. Starner. On reduced mechanism for methane-air combustion. In M.D. Smooke, editor, *Reduced kinetic mechanism and asymptotic approximations for methane-air flames*, volume 384 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, 1991. 66, 209
- [17] R.W. Bilger, S.B. Pope, K.N.C. Bray, and J.F. Driscoll. Paradigms in turbulent combustion research. In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 21–42, Pittsburgh, 2005. 2, 164
- [18] J. A. Blasco, N. Fueyo, C. Dopazo, and J.-Y. Chen. A self-organizing-map approach to chemistry representation in combustion applications. *Combustion Theory and Modeling*, 4:61–76, 2000. 66
- [19] J.A. Blasco. *Representación de la cinética química mediante redes neuronales artificiales para la simulación de flujos turbulentos reactivos*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 2000. 66
- [20] J.A. Blasco, N. Fueyo, C. Dopazo, and J. Ballester. Modelling the temporal evolution of a reduced combustion chemical system with an artificial neural network. *Combustion and Flame*, 113:38–52, 1998. 66, 164
- [21] D. Bouris and G. Bergeles. 2D LES of vortex shedding from a square cylinder. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 80:31–46, 1999. 182, 183
- [22] N. Branley and W.P. Jones. Large eddy simulations of a turbulent non-premixed flame. In *11th Symposium on Turbulent Shear Flows*, Grenoble, France, 1997. 96, 143, 162
- [23] N. Branley and W.P. Jones. Large eddy simulation of a turbulent non-premixed flame. *Combustion and flame*, 127:1914–1934, 2001. 4, 5, 43, 45, 48, 49, 57, 58, 60, 94, 143, 162
- [24] K.N.C. Bray. The challenge of turbulent combustion. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, pages 1–26, Pittsburgh, 1996. 46
- [25] K.N.C. Bray and P.A. Libby. Recent developments in the BML model of premixed turbulent combustion. In P.A. Libby and F.A. Williams, editors, *Turbulent reacting flows*, pages 115–152, London, 1994. Academic Press. 5, 48
- [26] M. Breuer and M. Pourquié. Large eddy simulation of complex turbulent flows of practical interest. In E. H. Hirschel, editor, *Low Simulation with High-Performance Computers II*, Notes on Num. Fluid Mech 52, pages 258–274, Braunschweig, 1996. Vieweg Verlag. 39
- [27] W.K. Bushe and H. Steiner. Conditional moment closure for large eddy simulation of non-premixed turbulent reacting flows. *Physics of Fluids*, 11:1896–1906, 1999. 47

-
- [28] W.H. Cabot and P. Moin. Large eddy simulation of scalar transport with the dynamic subgrid-scale model. In B. Galperin and S. A. Orszag, editors, *Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows*. Cambridge University Press, 1993. 34
- [29] W. Calhoon. *On subgrid combustion modeling for Large-Eddy Simulations*. PhD thesis, Georgia Institute of Technology, 1996. 7
- [30] C.M. Cha and P. Trouillet. Filtered density-function modeling for large-eddy simulations of turbulent reacting flows, 2002. 5, 48
- [31] V.K. Chakravarthy and S. Menon. Subgrid modeling of turbulent premixed flames in the flamelet regime. *Flow, Turbulence and Combustion*, 65:133–161, 2000. 7, 36, 63, 84
- [32] V.K. Chakravarthy and S. Menon. Large-eddy simulation of turbulent premixed flame in the flamelet regime. *Combustion Science and Technology*, 162:175–222, 2001. 36, 51, 64
- [33] V.K. Chakravarthy and S. Menon. Linear eddy simulations of reynolds number and schmidt number effects on turbulent scalar mixing. *Physics of Fluids*, 13(2):488–499, 2001. 63
- [34] J.R. Chasnov. Simulation of the kolmogorov inertial subrange using an improved subgrid model. *Physics of Fluids*, A 3:188–200, 1991. 23
- [35] J-Y. Chen. Challenges in modelling of turbulence-chemistry interactions with large eddy simulation. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 4(3-5):155–161, 2004. 2, 5, 6, 49, 213
- [36] J-Y. Chen, J.A. Blasco, N. Fueyo, and C. Dopazo. An economical strategy for storage of chemical kinetics: fitting in situ adaptive tabulation with artificial neural networks. In The Combustion Institute, editor, *28th Symposium (International) on Combustion*, pages 115–121, Pittsburgh, 2001. 66, 164
- [37] H. Choi and P. Moin. Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow. *Journal of Computational Physics*, 113:1–4, 1994. 76
- [38] F.K. Chow and P. Moin. A further study of numerical errors in large-eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 184:366–380, 2003. 74, 75
- [39] T.J. Chung. *Computational fluid dynamics*. Cambridge University Press, 2002. 70
- [40] P.J. Colucci, F.A. Jaber, and P. Givi. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. *Physics of Fluids*, 10(2):499–515, 1998. 2, 48, 51, 55, 59
- [41] Numerical convection schemes in PHOENICS. http://www.cham.co.uk/phoenics/d_lecs/numerics/scheme.htm. 165, 166
- [42] A. W. Cook and J. J. Riley. Subgrid-scale modeling for turbulent reacting flows. *Combustion and Flame*, 112:593–606, 1998. 48, 56, 80
- [43] A.W. Cook, J.J. Riley, and G. Kosály. A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows. *Combustion and Flame*, 109:332–341, 1997. 4, 5, 48, 56, 80

- [44] G.S. Costantinescu and K.D. Squires. LES and DES investigation of turbulent flow over a sphere. *AIAA*, paper 2000-0540, 2000. 79
- [45] B. Cuenot, F. Egolfopoulos, and T. Poinso. An unsteady laminar flamelet model for non-premixed combustion. *Combustion Theory and Modeling*, 4:77–99, 2000. 50
- [46] B. Cuenot and T. Poinso. Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. implications for turbulent diffusion combustion. In The Combustion Institute, editor, *25th Symposium (International) on Combustion*, pages 1383–1390, Pittsburgh, 1994. 55
- [47] I.G. Currie. *Fundamental mechanics of fluids*. McGraw-Hill, New York, 1974. 13
- [48] W.J.A. Dahm and K.A. Buch. Lognormality of the scalar dissipation pdf in turbulent flows. *Physics of Fluids A*, 1:1290–1293, 1989. 144
- [49] S.M. de Bruyn Kops, J.J. Riley, G. Kosály, and A.W. Cook. Investigation of modeling for non-premixed turbulent combustion. *Flow, Turbulence and Combustion*, 60:105–122, 1998. 4, 57, 80
- [50] J.W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 41:453–480, 1970. 2, 23, 30, 74
- [51] J.W. Deardorff. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. *ASME Journal of Engineering*, pages 429–438, 1973. 37
- [52] J.W. Deardorff. Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol*, 7:81–106, 1974. 23, 36
- [53] F.M. Denaro. Towards a new model-free simulation of high-reynolds-number flows: local average direct numerical simulation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 23:125–142, 1996. 37
- [54] F. di Mare, W.P. Jones, and K.R. Menzies. Large eddy simulations of a model gas turbine combustor. *Combustion and flame*, 137:278–294, 2004. 2, 4, 45
- [55] F. Ding, S.P. Arya, and Y.L. Ling. Large-eddy simulations of the atmospheric boundary layer using a new subgrid-scale model. *Environmental Fluid Mechanics*, 1:29–47, 2001. 23
- [56] J.A. Domaradzki and K.C. Loh. The subgrid-scale estimation model in the physical space representation. *Physics of Fluids*, 11:2330–2342, 1999. 37
- [57] J.A. Domaradzki, W.Liu, and M.E. Brachet. An analysis of subgrid-scale interactions in numerically simulated isotropic turbulence. *Physics of Fluids, A* 5:1747–1759, 1993. 31
- [58] J.A. Domaradzki, W.Liu, C. Härtel, and L. Kleiser. Energy transfer in numerically simulated wall-bounded turbulent flows. *Physics of Fluids*, 6:1583–1599, 1994. 31
- [59] C. Dopazo. Turbulent reacting flows. In P.A. Libby and F.A. Williams, editors, *Turbulent reacting flows*, pages 375–474, London, 1994. Academic Press. 5, 47, 48, 51

-
- [60] C. Dopazo, L. Valiño, and N. Fueyo. Statistical description of the turbulent mixing of scalar fields. *International Journal of Modern Physics B*, 11:2973–3014, 1997. 22
- [61] J.M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95:101–107, 1993. 48
- [62] P.A. Durbin. A perspective on recent developments in RANS modeling. In W. Rodi and N. Fueyo, editors, *Engineering Turbulence Modelling and Experiments 5*, pages 3–16. Elsevier Science Ltd., 2002. 22
- [63] T. Echekki, A.R. Kerstein, and T.D. Dreeben J-Y. Chen. Computation of turbulent jet diffusion flames using the one-dimensional turbulence model: hydrogen-air flames. *Combustion and flame*, 125:1083–1105, 2001. 51
- [64] H. El-Asrag, T. Lu, C.K. Law, and S. Menon. Simulation of soot formation in turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 150:108–126, 2007. 7, 85, 101, 104, 161
- [65] H. El-Asrag and S. Menon. Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames. In The Combustion Institute, editor, *31th Symposium (International) on Combustion*, pages 1747–1754, Pittsburgh, 2006. 7, 104
- [66] Turbulence European Research Community On Flow and Combustion. <http://ercoftac.mech.surrey.ac.uk/>, 2003. 182, 183, 195
- [67] A. Favre. Problems of hydrodynamics and continuum mechanics. *SIAM*, 1969. 42
- [68] E. Fernández-Tarrazo, A.L. Sánchez, A. Li nan, and F.A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 147:32–38, 2006. 66, 67
- [69] J. H. Ferziger. Large eddy simulation. In T. Gatski, M. Y. Hussaini, and J.L Lumley, editors, *Simulation and Modeling of Turbulent Flows*, pages 109–154. Oxford University Press, 1996. 28, 31, 33, 38, 39, 79
- [70] J.H. Ferziger. Higher level simulations of turbulent flow. In J.A. Essers, editor, *Computational Methods for Turbulent, Transonic and Viscous Flows*. Hemisphere, 1983. 28, 76
- [71] H. Forkel and J. Janicka. Large-eddy simulation of a turbulent hydrogen diffusion flame. *Flow, Turbulence and Combustion*, 65:163–175, 2000. 4
- [72] R.O. Fox. *Computational models for turbulent reacting flows*. Cambridge University Press, 2003. 6, 66, 164
- [73] R. Franke and W. Rodi. Calculations of vortex shedding past a square cylinder with various turbulence models. In *8th Symposium on Turbulent Shear Flows*, pages 189–204, Tec. Univ. Munich, France, 1991. Springer Berlin. 182, 200
- [74] J. Frölich and W. Rodi. Introduction to large-eddy simulations of turbulent flows. In B. Launder and N. Sandham, editors, *Closure strategies for turbulent and transitional flows*, ERCOF-TAC series, pages 267–298, U.K., 2002. Cambridge University Press. 31

- [75] C. Fureby and C. Lokstrom. Large-eddy simulation of bluff-body stabilized flames. In The Combustion Institute, editor, *25th Symposium (International) on Combustion*, pages 1257–1264, Pittsburgh, 1994. 5, 48
- [76] C. Fureby, G. Tabor, H.G. Weller, and A.D. Gosman. Differential subgrid stress models in large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 9:3578–3580, 1997. 37
- [77] C. Fureby, G. Tabor, H.G. Weller, and A.D. Gosman. Large eddy simulation of the flow around a square prism. *AIAA Journal*, 38:442–452, 2000. 38, 183
- [78] G.P. Galdi and W.J. Layton. Approximating the larger eddies in fluid motion ii: a model for space-filtered flow. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 10 (3):343–350, 2000. 37
- [79] F. Gao and O’Brien. A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows. *Physics of Fluids*, A 5:1282–1284, 1993. 55
- [80] P.H. Gaskell and K.C. Lau. Curvature-compensated convective transport: Smart, a new boundedness-preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8:617–641, 1988. 168
- [81] M. Germano. Turbulence: the filtering approach. *Journal of Fluid Mechanics*, 238:325–336, 1992. 32, 33
- [82] M. Germano. A Scale-Residual Model for Large-Eddy Simulation. In N.D. Sandham and L. Kleiser, editors, *Direct and Large Eddy Simulation III*, pages 3–16. Kluwer Academic Publishers, 1999. 3, 4
- [83] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A*, 3:1760–1765, 1991. 4, 32, 33
- [84] S. Ghosal. An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence. *Journal of Computational Physics*, 125:187–206, 1996. 75
- [85] S. Ghosal, T.S. Lund, P. Moin, and K. Akselvoll. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 286:229–255, 1995. 32, 35
- [86] S. Ghosal and P. Moin. The basic equations for the large-eddy simulation of turbulent flows in complex geometry. *Journal of Computational Physics*, 118:24–37, 1995. 27
- [87] E. Giacomazzi, V. Battaglia, and C. Bruno. The coupling of turbulence and chemistry in a premixed bluff-body flame as studied by LES. *Combustion and flame*, 138:320–335, 2004. 5, 46, 47, 48
- [88] S.S. Girimaji and Y. Zhou. Analysis and modeling of subgrid scalar mixing using numerical data. *Physics of Fluids*, A(8):1224–1236, 1996. 59, 143, 162
- [89] P. Glarborg, N.I. Lilliheie, S. Byggstoyl, B.F. Magnussen, P. Kilpinen, and M. Hupa. A reduced mechanism for nitrogen chemistry in methane combustion. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, pages 889–898, Pittsburgh, 1992. 66

-
- [90] Sub grid combustion modeling for compressible two-phase reacting flows. *V. Sankaran*. PhD thesis, Georgia Institute of Technology, 2003. 7
- [91] E. R. Hawkes and R. S. Cant. Implications of a flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 126:1617–1629, 2001. 48
- [92] D.C. Haworth, M.C. Drake, S.B. Pope, and R.J. Blint. The importance of time dependent flame structures in stretched laminar flamelet models for turbulent jet diffusion flames. In The Combustion Institute, editor, *22th Symposium (International) on Combustion*, pages 589–597, Pittsburgh, 1988. 55
- [93] D.C. Haworth and K. Jansen. Large-eddy simulation of unstructured deforming meshes: toward reciprocating ic engines. *Computers and Fluids*, 29:493–524, 2000. 23
- [94] A. Heyl and H. Bockhorn. Flamelet modeling of no formation in laminar and turbulent diffusion flames. *Chemosphere*, 42:449–462, 2001. 56
- [95] K. Horiuti. Large eddy simulation of turbulent channel flow by one-equation modeling. *Journal of the Physical Society of Japan*, 54:2855–2865, 1985. 36
- [96] M. Hossain, J.C. Jones, and W. Malalasekera. Modelling of a bluff-body nonpremixed flame using a coupled radiation/flamelet combustion model. *Flow, Turbulence and Combustion*, 67:217–234, 2001. 56
- [97] M. Ihme and H. Pitsch. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 1. a priori study and presumed pdf closure. *Combustion and Flame*, 155:70–89, 2008. 91
- [98] M. Ihme and H. Pitsch. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 2. application in les of sandia flames d and e. *Combustion and Flame*, 155:90–107, 2008. 91, 147
- [99] H.G. Im, T.S. Lund, and J.H. Ferziger. Large eddy simulation of turbulent front propagation with dynamic subgrid models. *Physics of Fluids*, 9:3826–3833, 1999. 48
- [100] J. Janicka and A. Sadiki. Large eddy simulation of turbulent combustion system. In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 537–547, Pittsburgh, 2005. 2, 4, 22, 44, 45, 47, 164
- [101] C. Jiménez. *Modelización de flujos reactivos: el método de la función de densidad de probabilidad en simulaciones de grandes escalas*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 1998. 27, 35, 74
- [102] C. Jiménez, F. Ducros, B. Cuenot, and B. Bédard. Subgrid scale variance and dissipation of a scalar field in large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 13:1748–1754, 2001. 57, 58, 59, 96, 143, 162

- [103] W.P. Jones. Models for turbulent flows with variable density and combustion. In W. Kollmann, editor, *Prediction methods for turbulent flows*, Lecture Series 1979-2, Rhode Saint Genese, Belgium, January 1979. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. 42
- [104] W.P. Jones. Large eddy simulation of turbulent combustion processes. *Computer Physics Communications*, 147:533–537, 2002. 41
- [105] W.P. Jones and R.P. Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 73:233–249, 1988. 91
- [106] A. Karpetis and R. Barlow. Measurements of scalar dissipation in a turbulent piloted methane/air jet flame. In The Combustion Institute, editor, *29th Symposium (International) on Combustion*, pages 1929–1936, Pittsburgh, 2002. 8, 88, 89, 144, 149
- [107] A. Karpetis and R. Barlow. Measurements of flame orientation and scalar dissipation in turbulent partially premixed methane flames. In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 663–670, Pittsburgh, 2004. 8, 88, 90, 144
- [108] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller. Sandia national laboratories report, sand89-8003, 1989. 204
- [109] A. Kempf, F. Flemming, and J. Janicka. Investigation of lengthscales, scalar dissipation and flame orientation in a piloted diffusion flame by LES. In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 575–582, Pittsburgh, 2005. 2, 5, 56, 90, 91, 94, 98, 111
- [110] A. Kempf, M. Klein, and J. Janicka. Efficient generation of initial- and inflow-conditions for transient turbulent flows in arbitrary geometries. *Flow, Turbulence and Combustion*, 74:67–84, 2005. 78, 98
- [111] A.R. Kerstein. Linear-eddy modeling of turbulent transport and mixing. *Combustion Science and Technology*, 60:441–445, 1988. 6
- [112] A.R. Kerstein. Linear-eddy modeling of turbulent transport. ii: Application to shear layer mixing. *Combustion and Flame*, 75:397–413, 1989. 6, 62, 64, 81, 84, 171
- [113] A.R. Kerstein. Linear-eddy modeling of turbulent transport. part 3: mixing and differential molecular diffusion in round jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 216:411–435, 1990. 6, 48, 51, 81, 171
- [114] A.R. Kerstein. Linear-eddy modeling of turbulent transport. part 6. microstructure of diffusive scalar mixing fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 231:361–394, 1991. 6, 48, 51, 62, 63, 64, 65, 81, 84, 171
- [115] A.R. Kerstein. Linear-eddy modeling of turbulent transport. part 4: structure of diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, 81:75–96, 1992. 6, 48, 51, 81, 171
- [116] A.R. Kerstein. Linear-eddy modeling of turbulent transport. part 7: finite-rate chemistry and multi-stream mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 240:289–313, 1992. 6, 48, 51, 171

-
- [117] A.R. Kerstein. One-dimensional turbulence part 2. staircases in double diffusive convection. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, 30:25–46, 1999. 5, 48, 51
- [118] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59:308–323, 1989. 76
- [119] W.W. Kim, S. Menon, and H.C. Mongia. Numerical simulations of reacting flows in a gas turbine combustor. *Combustion Science and Technology*, 143:25–62, 1999. 36
- [120] M. Klein, A. Sadiki, and J. Janicka. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186:652–665, 2003. 78
- [121] A.Y. Klimenko. Multicomponent diffusion of various scalars in turbulent flows. *Fluid Dynamics*, 25:327–334, 1990. 5, 48, 50
- [122] A.Y. Klimenko and R.W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25:595–687, 1999. 5, 48, 50
- [123] A.N. Kolmogorov. Dissipation of energy in a locally isotropic turbulence. *Doklady Akad. Nauk SSSR(English translation in: American Mathematical Society Translations 1958, Series 2, Vol 8, p. 87, Providence R.I)*, 32:131, 1941. 3, 23
- [124] R.H. Kraichnan. Eddy viscosity in two and three dimensions. *Journal of Atmospheric Sciences*, 33:1521–1536, 1976. 23
- [125] K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley & Sons, 1986. 19
- [126] S. Lee, S.K. Lele, and P. Moin. Direct numerical simulation of isotropic turbulence interacting with a weak shock wave. *Journal of Fluid Mechanics*, 251:533–562, 1993. 78
- [127] A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Advs. in Geophys, A* 18:237–248, 1974. 24, 28
- [128] B.P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Applied Numerical mathematics*, 6:85–105, 1979. 168
- [129] M. Lesieur. *Turbulence in fluids*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, second edition, 1991. 38, 77
- [130] S.K. Liew, K.N.C. Bray, and J.B. Moss. A flamelet model of turbulent non-premixed combustion. *Combustion Science and Technology*, 27:69–73, 1981. 51
- [131] D.K. Lilly. On the application of the eddy viscosity concept in the inertial subrange of turbulence. *NCAR Manuscript*, 123, 1966. 31, 32
- [132] D.K. Lilly. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In H.H. Goldstine, editor, *Proc. IBM Scientific Computing Symp. on Environmental Sciences*, pages 195–210, Yorktown Heights, NY, 1967. IBM. 2, 23, 31, 32

- [133] D.K. Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A*, 4:633–635, 1992. 4, 34
- [134] R.P. Lindstedt, S.A. Louloudi, and E.M. Váos. Joint scalar probability density function modeling of pollutant formation in piloted turbulent jet diffusion flames with comprehensive chemistry. In The Combustion Institute, editor, *28th Symposium (International) on Combustion*, pages 149–156, Pittsburgh, 2000. 90
- [135] T.S. Lud and E.A. Novikov. Parametrization of subgrid-scale stress by the velocity gradient tensor. In *Annual Research Briefs*, pages 27–43. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford University, 1992. 37
- [136] T.S. Lund, X. Wu, and D. Squires. Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulation. *Journal of Computational Physics*, 140:233–258, 1998. 77
- [137] M. Lygren and H. Anderson. Influence of boundary conditions on the large scale structures in turbulent plane couette flow. In S. Banerjee and J. Eaton, editors, *Turbulence and Shear Flow 1*, pages 15–20. Begell House, 1999. 77
- [138] D. Lyn, S. Einav, W. Rodi, and J. Park. A laser doppler velocimetry study of ensemble-averaged characteristics of the turbulent near wake of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 304:285–319, 1995. 181, 182, 190, 191, 196, 211
- [139] D. Lyn and W. Rodi. The flapping shear layer formed by flow separation from the forward corner of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 267:353–376, 1994. 181, 182, 190, 191, 196, 211
- [140] H. Lübcke, S. Schmidt, T. Rung, and F. Thiele. Comparison of LES and RANS for bluff-body flows. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 89:1471–1485, 2001. 182
- [141] B.F. Magnussen. Modeling of pollutant in gas turbine combustor based on the eddy dissipation concept. Technical report, N-7034. Division of thermodynamics, Trondheim, Norwegian Institute of technology, 1989. 5
- [142] B.F. Magnussen and B.H. Hjertager. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In The Combustion Institute, editor, *16th Symposium (International) on Combustion*, pages 719–729, Pittsburgh, 1977. 5, 49
- [143] P.J. Mason. Large-eddy simulation: a critical review of the technique. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society.*, 7:81–106, 1974. 23
- [144] A.R. Masri. Data-base available from <http://www.aeromech.usyd.edu.au/thermofluids/>. 87, 88
- [145] A.R. Masri and R.W. Bilger. Turbulent non-premixed flames of hydrocarbon fuels near extinction: mean structure from probe measurements. In The Combustion Institute, editor, *21th Symposium (International) on Combustion*, pages 1511–1520, Pittsburgh, 1986. 88

-
- [146] A.R. Masri, R.W. Dibble, and R.S. Barlow. The structure of turbulent nonpremixed flames revealed by raman-rayleigh-LIF measurements. *Progress in Energy and Combustion Science*, 22:307–362, 1996. 8, 87, 88
- [147] J. Maurer and M. Fey. A scale-residual model for large-eddy simulation. In N.D. Sandham and L. Kleiser, editors, *Direct and Large Eddy Simulation III*, pages 237–248. Kluwer Academic Publishers, 1999. 37
- [148] P.A. McMurtry, S. Menon, and A.R. Kerstein. A linear eddy sub-grid model for turbulent reacting flows: Application to hydrogen-air combustion. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, pages 271–278, Pittsburgh, 1992. 4, 7, 81, 83
- [149] C. Meneveau, T.S. Lund, and W.C. Cabot. A lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 329:353–385, 1996. 35
- [150] S. Menon. Subgrid combustion modeling for large eddy simulations. *International Journal of Engine Research*, 1:209–227, 2000. 37
- [151] S. Menon, C. Stone, and N. Patel. Multi-scale modeling for les of engineering designs of large-scale combustors. *AIAA paper*, (2004-0157), 2004. 63
- [152] S. Menon and W. Calhoun. Subgrid mixing and molecular transport modeling for large-eddy simulation of turbulent reacting flows. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, pages 59–66, Pittsburgh, 1996. 7, 44, 62
- [153] J.A. Miller and C.T. Bowman. Mechanism and modelling of nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15:287–338, 1989. 90
- [154] A. Misra and D.I. Pullin. A vortex-based subgrid stress model for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 9:2443–2454, 1997. 37
- [155] Y. Mizobuchi, S. Tachibana, S. Ogawa, and T. Takeno. A numerical analysis of the structure of a turbulent hydrogen jet lifted flame. In The Combustion Institute, editor, *29th Symposium (International) on Combustion*, pages 2009–20015, Pittsburgh, 2002. 22
- [156] C.H. Moeng. A large-eddy simulation model for the study of planetary boundary-layer turbulence. *Journal of Atmospheric Sciences*, 41:2052–2062, 1984. 36
- [157] P. Moin. Advances in large eddy simulation methodology for complex flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23:710–720, 2002. 23
- [158] P. Moin and J. Kim. Numerical investigation of turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 118:341–377, 1982. 23, 31
- [159] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic sub-grid scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Physics of Fluids*, A 3:2746–2757, 1991. 32, 45

- [160] S. Mukerji, J.M. McDonough, M.P. Menguc, S. Manickavasagam, and S. Chung. Chaotic map models of soot fluctuations in turbulent diffusion flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41:4095–4112, 1998. 37
- [161] S. Murakami and A. Mochida. On turbulent vortex shedding flow past a square cylinder predicted by cfd. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 54:191–211, 1995. 183
- [162] R. Mustata, L. Valiño, C. Jiménez, W.P. Jones, and S. Bondi. A probability density function eulerian monte carlo field method for large eddy simulations: Application to a turbulent piloted methaneair diffusion flame (sandia d). *Combustion and Flame*, 145:88–104, 2006. 4, 91, 94, 99, 111
- [163] S. I. Möller, E. Lundgren, and C. Fureby. Large eddy simulation of unsteady combustion. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, pages 241–248, Pittsburgh, 1996. 5, 48, 49
- [164] A. Nakayama and S.N. Vengadesan. On the influence of numerical schemes and subgrid-stress models on large eddy simulation of turbulent flow past a square cylinder. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 38:227–253, 2002. 182
- [165] N. Nakicenikovic, A. Gruber, and A. McDonald editors. *Global energy perspectives*. Cambridge University Press, Cambridge, May 1998. 1
- [166] S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and D. Di Mare. Conditional moment closure for large eddy simulations. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75:245–274, 2005. 91, 111, 147
- [167] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62:183–200, 1999. 35
- [168] B. Noll. Evaluation of a bounded high-resolution scheme for combustor flow computations. *AIAA Journal*, 30(1):64–69, 1992. 161, 168
- [169] Visual Numerics. <http://www.vni.combooksdodpdfFortranFC.pdf>, 2005. 207
- [170] J.S. Ochoa and N. Fueyo. Large eddy simulation of a flow past a square cylinder. In R. Rivero, L. Monroy, R. Pulido, and G. Tsatsaronis, editors, *Energy-Efficient, Cost-Effective and Environmentally-Sustainable Systems and Processes*, pages 37–50, Guanajuato, México, July 2004. 181
- [171] J.S. Ochoa and N. Fueyo. Large eddy simulation of a flow past a square cylinder. In CHAM Ltd., editor, *International PHOENICS conference*, Melbourne, Australia, May 2004. 181
- [172] International Energy Agency: Working Party on Fossil Fuels. Solutions for the 21st century. zero emissions technologies for fossil fuels: energy security, environmental protection and economic development; <http://www.iea.org/textbase/publications/>, 2002. 1
- [173] International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Non-premixed Flames. Proceedings of the TNF workshop series: <http://www.ca.sandia.gov/tnf>. 8, 9, 87, 88, 90, 159, 164, 214

-
- [174] S. Pannala. *On Large Eddy Simulations of reacting two-phase flows*. PhD thesis, Georgia Institute of Technology, 2000. 7, 60, 64, 176
- [175] C. Pantano, S. Sarkar, and F.A. Williams. Mixing of a conserved scalar in a turbulent reacting shear layer. *Journal of Fluids Mechanics*, 481:291–328, 2003. 144
- [176] D. Papailiou, P. Koutmos, C. Mavridis, and A. Bakrozis. Simulations of local extinction phenomena in bluff-body stabilized flames with a lagrangian reactedness model. *Combustion Theory and Modeling*, 3:409–431, 1999. 37
- [177] N. Park, J.Y. Yoo, and H. Choi. Discretization errors in large eddy simulation: on the suitability of centered and upwind-biased compact difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 198:580–616, 2004. 75
- [178] S. V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 70, 72, 73, 166
- [179] S. V. Patankar and D. B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:1787–1806, 1972. 73
- [180] S.V. Patankar and D.B. Spalding. A computer model for three dimensional flow in furnaces. In The Combustion Institute, editor, *14th Symposium (International) on Combustion*, pages 605–614, Pittsburgh, 1972. 44
- [181] N. Patel and S. Menon. Simulation of spray-turbulence-flame interactions in a lean direct injection combustor. *Combustion and Flame*, 153:228–257, 2008. 7, 104
- [182] J.H. Peric and M. Ferziger. *Computational Methods for Fluid Dynamic*. Springer-Verlag, Berlin, 1996. 29, 70, 75, 76, 94, 165, 169
- [183] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10:319–339, 1984. 2, 55
- [184] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In The Combustion Institute, editor, *21th Symposium (International) on Combustion*, pages 1231–1250, Pittsburgh, 1986. 2, 5, 50, 51, 52
- [185] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 2000. 4, 11, 19, 42, 47, 48, 51, 52, 54, 55, 56, 149, 211
- [186] Concentration Heat and Momentum, (CHAM) Ltd. PHOENICS V3.5. <http://www.cham.co.uk/>. 69, 93, 183, 199
- [187] C.D. Pierce and P. Moin. A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Physics of Fluids*, 10:3041–3044, 1998. 59, 143, 162
- [188] U. Piomelli. High reynolds number calculations using the dynamic sub-grid scale stress model. *Physics of Fluids*, A 5:1484–1490, 1993. 23

- [189] U. Piomelli. Large-eddy and direct simulation of turbulent flows. In *Short course delivered at CFD2001*, Kitchener, Ontario, May 2001. 9e conférence annuelle de la Société canadienne de CFD. 3, 21, 33, 36, 39, 76, 77
- [190] U. Piomelli and J.R. Chasnov. Large-eddy simulations: Theory and applications. In M. Hallback, D.S. Henington, A.V. Johansson, and P.H. Alfredsson, editors, *Turbulence and Transition Modelling*, ERCOFTAC series, pages 269–336, The Netherlands, 1996. Kluwer Academic Publishers. 21, 39, 76
- [191] U. Piomelli, T.A. Zang, C.G. Speziale, and M.Y. Hussaini. On the large-eddy simulation of transitional wall-bounded flows. *Physics of Fluids*, A 2:257–265, 1990. 31
- [192] H. Pitsch. Extended flamelet model for LES of non-premixed combustion. In *Annual Research Briefs*, pages 149–158. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford University, 2000. 50, 91
- [193] H. Pitsch. Improved pollutant predictions in large-eddy simulations of turbulent non-premixed combustion by considering scalar dissipation rate fluctuations. In The Combustion Institute, editor, *29th Symposium (International) on Combustion*, pages 1971–1978, Pittsburgh, 2002. 2, 91
- [194] H. Pitsch, M. Chen, and N. Peters. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In The Combustion Institute, editor, *27th Symposium (International) on Combustion*, pages 1057–1064, Pittsburgh, 1998. 55
- [195] H. Pitsch and L. Duchamp de Lageneste. Large-eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level set approach. In The Combustion Institute, editor, *29th Symposium (International) on Combustion*, pages 2001–2008, Pittsburgh, 2002. 48
- [196] H. Pitsch and H. Steiner. Large eddy simulation of a turbulent piloted methaned/air diffusion flame (sandia flame d). *Physics of Fluids*, 12:2541–2554, 2000. 45, 48, 50, 91, 94, 99, 111
- [197] T. Poinso, S. Candel, and A. Trouvé. Applications of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion. *Progress in Energy Combustion Science*, 21:531–576, 1996. 22
- [198] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, Inc, 2001. 11, 16, 47, 52, 53, 164
- [199] S.B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11:119–192, 1985. 5, 47, 48, 51
- [200] S.B. Pope. Computations of turbulent combustion: Progres and challenges. In The Combustion Institute, editor, *23th Symposium (International) on Combustion*, pages 591–612, Pittsburgh, 1990. 55
- [201] S.B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modeling*, 1:41–63, 1997. 66, 90, 164
- [202] S.B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. 11, 23, 26, 34, 35, 39, 47, 78, 85, 92, 160, 211

-
- [203] S.B. Pope. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6, 2004. 4, 39, 74, 78, 85, 92, 160
- [204] F.C. Porté-Agel, C. Meneveau, and M.B. Parlange. A scale-dependent dynamic model for large-eddy simulation: application to the atmospheric boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 415:261–284, 2000. 35
- [205] Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion. P. domingo and l. vervisch and k. bray. *Combustion Theory and Modeling*, 6:529–551, 2002. 4
- [206] C. Prière, L.Y.M. Gicquel, P. Kaufman, W. Krebs, and T. Poinso. Large eddy simulation predictions of mixing enhancement for jets in cross-flows. *Journal of Turbulence*, 5, 2004. 43
- [207] M.M. Rai and P. Moin. Direct simulations of turbulent flow using finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 96:15–53, 1991. 75, 182
- [208] V. Raman, R.O. Fox, and A.D. Harvey. Hybrid finite-volume/transported PDF simulations of a partially premixed methane-air flame. *Combustion and flame*, 136:327–350, 2004. 90
- [209] V. Raman and H. Pitsch. Large-eddy simulation of a bluff body stabilized non-premixed flame using a recursive-refinement procedure. *Combustion and Flame*, 142:329–347, 2005. 4, 56, 74
- [210] V. Raman, H. Pitsch, and R.O. Fox. Hybrid large-eddy simulation/lagrangian filtered-density-funtion approach for simulating turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143:56–78, 2005. 59, 96, 102, 143, 163
- [211] S. Rao and C.J. Rutland. A flamelet time scale model for non-premixed combustion including chemical effects. *Combustion and Flame*, 133:189–191, 2002. 50
- [212] W.C. Reynolds. The potential and limitations of direct and large eddy simulations. In J.L. Lumley, editor, *Whither turbulence? Turbulence and the Crossroads*, volume 357 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, 1989. 30
- [213] L.F. Richardson. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 1922. 23
- [214] W. Rodi. On the simulation of turbulent flow past bluff bodies. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 46-47:3–19, 1993. 183
- [215] W. Rodi. Comparisons of LES and RANS calculations of the flow around bluff bodies. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 69-71:55–75, 1997. 182, 196, 200, 211
- [216] W. Rodi, J H. Ferziger, M. Breuer, and M. Pourquié. In *Proc. Workshop on Large-Eddy Simulation of Flows past Bluff Bodies*, Rottach-Egern, Tegernsee, Germany, June 1995. 182, 183, 190, 193, 196, 211

- [217] W. Rodi, J. H. Ferziger, M. Breuer, and M. Pourquié. Status of large-eddy simulation: results of a workshop. *Journal of Fluids Engineering*, 119:248–262, 1997. 30, 182, 183, 190, 193, 196, 211
- [218] P.L. Roe. Some contributions to the modelling of discontinuous flows. In Somerville Engquist, Osher, editor, *Proceedings of the Fifteenth Summer Seminar on Applied Mathematics*, pages 163–193, La Jolla, CA, 1985. American Mathematical Society. 168
- [219] P.L. Roe and M.J. Baines. Algorithms for advection and shock problems. In Viviand, editor, *Proceedings of the Fourth GAMM Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, volume 5, pages 281–290, Vieweg, 1982. 168
- [220] R.S. Rogallo and P. Moin. Numerical simulation of turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mech*, 16:99–137, 1994. 39
- [221] B. Rogg. RUN-1DL: The Cambridge universal laminar flamelet computer code. In N. Peters and B. Rogg, editors, *Reduced kinetic mechanism for applications in combustion systems, appendix C*, Berlin-Heidelberg, 1993. Springer-Verlag. 70, 79, 203
- [222] B. Rogg and W. Wang. RUN-1DL: The universal laminar flame and flamelet computer code, user manual, 1997. 70, 79, 203
- [223] M.R. Romina and R.W. Bilger. Conditional moment closure (CMC) predictions of a turbulent methane-air jet flame. *Combustion and Flame*, 125:1176–1195, 2001. 90
- [224] P. Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer-Verlag, 2001. 3, 4, 25, 26, 28, 29, 31, 34, 35, 37, 39, 85, 182, 211
- [225] V. Sankaran, T.G. Drozda, and J.C. Oefelein. A tabulated closure for turbulent non-premixed combustion based on the linear eddy model. In The Combustion Institute, editor, *32th Symposium (International) on Combustion*, pages 1571–1578, Pittsburgh, 2009. 8
- [226] V. Sankaran and S. Menon. Structure of premixed turbulent flames in the thin-reaction-zones regime. In The Combustion Institute, editor, *28th Symposium (International) on Combustion*, pages 203–209, Pittsburgh, 2000. 85, 101
- [227] V. Sankaran and S. Menon. Vorticity-scalar alignments and small-scale structures in swirling spray combustion. In The Combustion Institute, editor, *29th Symposium (International) on Combustion*, pages 577–584, Pittsburgh, 2002. 7
- [228] V. Sankaran and S. Menon. Subgrid combustion modeling of 3-D premixed flames in the thin-reaction-zone regimen. In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 575–582, Pittsburgh, 2005. 60, 84
- [229] J.U. Schlüter. *Large eddy simulations of flow and mixing in Jets and swirl flows: application to a gas turbine*. PhD thesis, European Centre for Research and Advance Training in Cientific Computation (CERFACS), France, 2000. 45
- [230] H. Schmidt and U. Schumann. Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. *Journal of Fluids Mechanics*, 200:511–562, 1989. 45

-
- [231] R.C. Schmidt, A.R. Kerstein, S. Wunsch, and V. Nilsen. Near-wall LES closure based on one-dimensional turbulence modeling. *Journal of Computational Physics*, 186:317–355, 2003. 79
- [232] Ch. Schneider, A. Dreizler, J. Janicka, and E.P. Hassel. Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames. *Combustion and flame*, 135:185–190, 2003. 8, 88, 89, 100
- [233] U. Schumann. Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *Journal of Computational Physics*, 18:376–404, 1975. 36, 74, 213
- [234] A. Scotti and C. Meneveau. A fractal model for large-eddy simulation of turbulent flow. *Physica D*, 127:198–232, 1999. 37
- [235] M.R.H. Sheiki, T.G. Drozda, P. Givi, F.A. Jaber, and S.B. Pope. Large eddy simulation of a turbulent nonpremixed piloted methane jet flame (sandia flame d). In The Combustion Institute, editor, *30th Symposium (International) on Combustion*, pages 549–556, Pittsburgh, 2005. 91
- [236] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations I. The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91:99–165, 1963. 2, 3, 4, 23, 30
- [237] S. Menon, P.A. McMurtry, and A.R. Kerstein. A linear eddy mixing model for large eddy simulation of turbulent combustion. In B. Galperin and S. A. Orszag, editors, *Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows*, pages 287–314. Cambridge University Press, 1993. 2, 5, 43, 64, 83, 161
- [238] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, V. V. Lissianski, and Z. Qin. GRI-Mech web site, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/. 65, 90
- [239] T.M. Smith and S. Menon. Model simulations of freely propagating turbulent premixed flames. pages 299–306, 1996. 7, 63, 85, 101, 161
- [240] T.M. Smith and S. Menon. One-dimensional simulations of freely propagating turbulent premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 128:99–130, 1996. 7
- [241] T.M. Smith and S. Menon. Subgrid combustion modeling for premixed turbulent flows. *AIAA paper*, 98-0242, 1998. 64
- [242] M.D. Smooke and V. Giovangigli. Formulation of the premixed and nonpremixed test problems. In M.D. Smooke, editor, *Reduced kinetic mechanism and asymptotic approximations for methane-air flames*, volume 384 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, 1991. 66, 209
- [243] A. Sohankar, L. Davidson, and C. Norberg. Large eddy simulation of flow past a square cylinder: comparison of different subgrid scale models. *Journal of Fluids Engineering*, 122:39–47, 2000. 38, 182, 183

- [244] K. Sone and S. Menon. Effect of subgrid modeling on the in-cylinder unsteady mixing process in a direct injection engine. *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 125:435–443, 2003. 7, 36, 37, 44, 48
- [245] P.R. Spalart, W.H. Jou, M. Strelets, and S.R. Allmaras. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANSLES approach. In C. Liu and Z. Liu, editors, *Advances in DNS/LES*, page 137. Greyden Press, Columbus, 1997. 79
- [246] D. B. Spalding. Mathematical modelling of fluid dynamics, heat transfer and mass transfer processes. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1980. 73
- [247] D. B. Spalding. A general-purpose computer program for multi-dimensional one and two-phase flows. In *IMACS Meeting*, Lehigh University, Pennsylvania, 1981. 76, 165, 168
- [248] D.B. Spalding. Mixing and chemical reaction in steady, confined turbulent flames. In The Combustion Institute, editor, *13th Symposium (International) on Combustion*, pages 649–657, Pittsburgh, 1971. 49
- [249] D.B. Spalding. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 4:551–559, 1972. 167
- [250] G. De Stefano, F.M. Denaro, and G. Riccardi. Analysis of 3d backward-facing step compressible flows via a local averaged-based numerical procedure. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 28:1073–1091, 1998. 37
- [251] H. Steiner and W.K. Bushe. Large eddy simulation of a turbulent diffusion flame with conditional source-term estimation. In *Annual Research Briefs*, pages 45–58. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford University, 1999. 47, 91
- [252] H. Steiner and W.K. Bushe. Large eddy simulation of a turbulent reacting jet with conditional source-term estimation. *Physics of Fluids*, 13:754–769, 2001. 91
- [253] S. Stolz and N.A. Adams. An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 11:1699–1701, 1999. 37
- [254] S. Stolz, N.A. Adams, and L. Kleiser. The approximate deconvolution model applied to LES of turbulent channel flow. In N.D. Sandham and L. Kleiser, editors, *Direct and Large Eddy Simulation III*, pages 163–174. Kluwer Academic Publishers, 1999. 37
- [255] C. Stone and S. Menon. Simulation of fuel-air mixing and combustion in a trapped-vortex combustor. *AIAA paper*, 2000-0478, 2000. 62
- [256] P. K. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 21:995–1011, 1984. 76, 168
- [257] G.I. Taylor. Statistical theory of turbulence. In *Proceedings of the Royal Society of London*, volume 151 of A, page 421, 1935. 29

-
- [258] R. Temam. *Navier-Stokes equations: Theory and numerical analysis*. revised edition. North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1979. 77
- [259] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A first course in turbulence*. MIT Press, 1997. 29
- [260] S. Tullis and R.S. Cant. Escalar transport modeling in large eddy simulation of turbulent premixed flames. In The Combustion Institute, editor, *29th Symposium (International) on Combustion*, pages 2097–2104, Pittsburgh, 2002. 4, 43
- [261] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. iii. upstream-centered finite difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 23:263–275, 1977. 168
- [262] H.K. Versteeg and W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. Pearson Prentice Hall, 1995. 70, 73, 174
- [263] L. Vervisch. Using numerics to help the understanding of non-premixed turbulent flames. In The Combustion Institute, editor, *28th Symposium (International) on Combustion*, pages 11–24, Pittsburgh, 2000. 5, 46, 47
- [264] L. Vervisch, P. Domingo, and P. Hauguel. Turbulent combustion in the light of direct and large eddy simulation. *Proc. of the Third Int. Symp. on Turb. and Shear Flow Phenomena III*, pages 847–856, 2003. 22
- [265] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling: DNS of premixed v-flame, LES of lifted nonpremixed flame and RANS of jet-flame. *Journal of Turbulence*, 5, 2004. 22
- [266] L. Vervisch and T. Poinso. Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flames. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30:655–691, 1998. 22
- [267] L. Vervisch and D. Veynante. Interlinks between approaches for modeling turbulent flames. In The Combustion Institute, editor, *28th Symposium (International) on Combustion*, pages 175–183, Pittsburgh, 2000. 4, 5, 46, 47
- [268] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy Combustion Science*, 28:193–266, 2002. 4, 43, 164
- [269] W. Vicente. *Simulación numérica de la combustión y formación de contaminantes en llamas turbulentas premezcladas pobres*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 2000. 65
- [270] A.W. Vreman, B.A. Albrecht, J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, and R.J.M. Bastiaans. Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of sandia flame d and f. *Combustion and Flame*, 153:394–416, 2008. 91
- [271] B. Vreman, B. Geurts, and H. Kuerten. Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 339:357–390, 1997. 31
- [272] G. Wang, A.N. Karpetis, and R.S. Barlow. Dissipation length scales in turbulent nonpremixed jet flames. *Combustion and Flame*, 148:62–75, 2007. 144

- [273] H. Wang and Y. Chen. PDF modelling of turbulent non-premixed combustion with detailed chemistry. *Chemical Engineering Science*, 59:3477–3490, 2004. 90
- [274] J. Warnatz, U. Maas, and R. W. Dibble. *Combustion: physical and Chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*. Springer, 1996. 4, 13, 15, 16, 17, 67
- [275] N. P. Waterson. Development of bounded higher-order convection scheme for general industrial applications. Technical Report 1994-33, Von Karman Institute, Belgium, 1994. 93, 165, 168
- [276] N. P. Waterson and H. Deconinck. *A unified approach to the design and application of Bounded higher-order convection schemes*. CFD Lectures Series 1995-21, von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode-Sain-Genese, Belgium, 1995. 93, 165, 166, 175
- [277] N.P. Waterson and H. Deconinck. Design principles for bounded higher-order convection schemes - a unified approach. *Journal of Computational Physics*, 224:182–207, 2007. 93, 102, 165, 166, 175
- [278] B. Wegner, A. Kempf, Ch. Schneider, A. Sadiki, A. Dreizler, and J. Janicka. Large eddy simulation of combustion processes under gas turbine conditions. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 4(3-5):257–263, 2004. 2
- [279] B. Wegner, A. Maltsev, Ch. Schneider, A. Sadiki, A. Dreizler, and J. Janicka. Assessment of unsteady RANS in predicting swirl flow instability based on LES and experiments. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 25:528–536, 2004. 22
- [280] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Chemical kinetic modelling of hydrocarbon combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10:1–57, 1984. 7
- [281] F.A. Williams. Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames. In S.N.B. Murthy, editor, *Turbulent mixing in nonreactive and reactive flows*, pages 189–208, New York, 1975. Plenum Press. 51
- [282] F.A. Williams. *Combustion theory*. Benjamin/Cummings, 1985. 15, 16, 17, 19
- [283] F.A. Williams. Turbulent combustion. In J. Buckmaster, editor, *The mathematics of combustion*, pages 99–131. SIAM, 1985. 48
- [284] F.A Williams. Progress in knowledge of flamelet structure and extinction. *Progress in Energy Combustion Science*, 26:657–682, 2000. 56
- [285] M. Willie. *Large Eddy Simulation of jets in cross flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 2000. 36, 78
- [286] G.S. Winckelmans, T.S.Lund, D. Carati, and A. Wray. A priori testing of subgrid-scale models for the velocity-pressure formulations. In Center for Turbulence Research, editor, *Proceedings of the Summer Program*, pages 309–329, Standford, 1996. 28

-
- [287] A.A. Wray and J.C.R. Hunt. Algorithms for the classification of turbulent structures. In *Proceedings of the IUTAM Symposium Topological Fluid Mechanics*, pages 99–104, 1989. 35
- [288] J. Xu and S.B. Pope. PDF calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinction. *Combustion and flame*, 123:281–307, 2000. 90
- [289] M. Yaga, H. Endo, T. Yamamoto, H. Aoki, and T. Miura. Modeling of eddy characteristic time in LES for calculating turbulent diffusion flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45:2343–2349, 2002. 48, 49
- [290] A. Yakhot, S.A. Orszag, V. Yakhot, and M. Israeli. Renormalization group formulation of large-eddy simulation. *Journal of Cientific Computing*, 4:139–158, 1989. 32
- [291] A. Yoshizawa. A statistically-derived subgrid model for the large-eddy simulation of turbulence. *Physics of Fluids*, A 3:2007–2009, 1991. 36
- [292] Y. Zang, R.L. Street, and J. Koseff. A dynamic mixed model and its application to turbulent recirculating flows. *Physics of Fluids*, A 5:3186–3196, 1993. 31
- [293] Y. Zheng, R.S. Barlow, and J.P. Gore. Spectral radiation properties of partially premixed turbulent flames. *Journal of Heat Transfer*, 126:1065–1073, 2003. 44
- [294] G. Zhou, L. Davidson, and E. Olson. Transonic inviscid/turbulent airfol flow simulations using a pressure-based method with high order schemes. *Lecture Notes in Physics*, 453:372, 1995. 168