



EPS

Escola Politècnica

UdG

Superior

Projecte/Treball Fi de Carrera

Estudi: Enginyeria Industrial. Pla 2002.

Títol: Simulació de processos de combustió de sòlids prims

Document: Memòria i Annexos: Volum 2 Annexos

Alumne: Javier Revert Peris

Director/Tutor: Antoni Pujol i Sagaró

Departament: Eng. Mecànica i de la Construcció Industrial

Àrea: Mecànica de Fluids

Convocatòria (mes/any): 09/2012

ÍNDIX

A	La simulació amb CFD.....	1
A.1	Introducció.....	1
A.2	Geometria.....	1
A.3	Malla.....	6
A.4	Simulació.....	7
A.5	Postprocés	12
B	Execució Fluent per compilar UDF	13
C	Annex UDS.....	14
C.1	L'equació general de transport escalar: Discretització i solució.....	14
C.2	Discretització espacial.....	15
D	Annex UDF	16
D.1	Objectiu d'ús de les UDFs?.....	16
D.2	Terminologia del mallat.....	16
D.3	Tipus de dades en ANSYS FLUENT	17
E	Programa en C per el cas 1	20
F	Programa en C per el cas 2	31
G	Annex de resultats.....	44
G.1	Cas 1:.....	44
G.2	Cas 2.....	53
H	PRESSUPOST	69

EQUACIONS

Eq. 1.-	Equació transitòria de la conservació de ϕ	14
Eq. 2.-	Equació transitòria de la conservació inestable per el transport de ϕ	14

FIGURES

Figura 1.- Introducció de nodes	2
Figura 2.- Creació de línies a partir de nodes	3
Figura 3.- Unió de les línies per crear una superfície.....	4
Figura 4.- Configuració dels contorns de la superfície.....	5
Figura 5.- Configuració del tipus de mallat.....	6
Figura 6.- Mallat	7
Figura 7.- Edició del models amb el programa ANSYS FLUENT	8
Figura 8.- Edició dels materials amb el programa ANSYS FLUENT	9
Figura 9.- Edició de les cel·les amb el programa ANSYS FLUENT	10
Figura 10.- Edició de les condicions de contorn amb el programa ANSYS FLUENT	11
Figura 11.- Compilació de les UDS amb el programa ANSYS FLUENT	11
Figura 12.- Execució de l'ANSYS FLUENT mitjançant el CMD Shell.....	13
Figura 13.- Volum de control emprat per il·lustrar la discretització d'una equació de transport escalar.....	15
Figura 14.- Terminologia del mallat.....	17
Figura 15.- Contorns de temperatura (K).....	44
Figura 16.- Contorns de velocitats (m/s).....	45
Figura 17.- Concentració en massa d'oxigen.....	45
Figura 18.- Concentració de fuel.....	46
Figura 19.- Contorns de temperatura (K).....	47
Figura 20.- Contorns de velocitats (m/s).....	47
Figura 21.- Concentració de oxigen.....	48
Figura 22.- Concentració de fuel.....	49
Figura 23.- Contorn de temperatura (K).....	50
Figura 24.- Contorns de velocitats (m/s).....	50

Figura 25.- Concentració en massa d'oxigen.....	51
Figura 26.- Concentració de fuel.....	51
Figura 27.- Contorns de temperatura (K).....	53
Figura 28.- Contorns de velocitats (m/s).....	53
Figura 29.- Contorns de densitat (kg/m ³).....	54
Figura 30.- Concentracions en massa d'oxigen.....	55
Figura 31.- Concentracions en massa de fuel	55
Figura 32.- Contorns de temperatura (K).....	57
Figura 33.- Contorns de velocitats (m/s).....	57
Figura 34.- Contorns de densitat (kg/m ³).....	58
Figura 35.- Concentracions en massa d'oxigen.....	58
Figura 36.- Concentracions en massa de fuel	59
Figura 37.- Contorns de temperatura (K).....	60
Figura 38.- Contorns de velocitats (m/s).....	61
Figura 39.- Contorns de densitat (kg / m ³).....	61
Figura 40.- Concentracions en massa d'oxigen.....	62
Figura 41.- Concentracions en massa de fuel	62
Figura 42.- Contorns de temperatura (K).....	63
Figura 43.- Contorns de velocitats (m/s).....	63
Figura 44.- Contorns de densitat (kg/m ³).....	64
Figura 45.- Concentracions en massa d'oxigen.....	64
Figura 46.- Concentracions en massa de fuel	65

TAULES

Taula 1.- Evolució de la flama en funció del temps.....	68
Taula 2.- Factura.....	69

A LA SIMULACIÓ AMB CFD

A.1 Introducció

El programa DFC FLUENT d'ANSYS Inc és un programa informàtic de dinàmica de fluids computacional CFD. Aquest programa utilitza el mètode numèric dels volums finits per transformar les equacions que governen la dinàmica de fluids en sistemes d'equacions algebraiques. El programa també permet s i algorismes per resoldre i analitzar problemes multifàsics sobre fluxos de substàncies com gasos i líquids incloent , també, la interacció amb sòlids. Totes aquestes substàncies es poden definir per l'usuari.

A.2 Geometria

El primer que s'ha de tenir en compte alhora de resoldre un problema en aquest programa es definir la geometria concreta sobre la qual es vol treballar. Aquesta geometria podrà ser en dues dimensions o en tres dimensions.

S'haurà de crear la geometria del problema amb un programa diferent al FLUENT ja que aquest programa es limita als càlculs posteriors.

El programa utilitzat per realitzar la geometria serà el Gambit. S'hauran de realitzar una sèrie de passos per realitzar la geometria. A continuació es mostra un exemple per fer la malla d'una geometria en dues dimensions.

1) Introduir els quatre nodes mitjançant les coordenades X i Y. A la Figura 1 s'observa com s'introdueixen els nodes mitjançant les coordenades cartesianes.

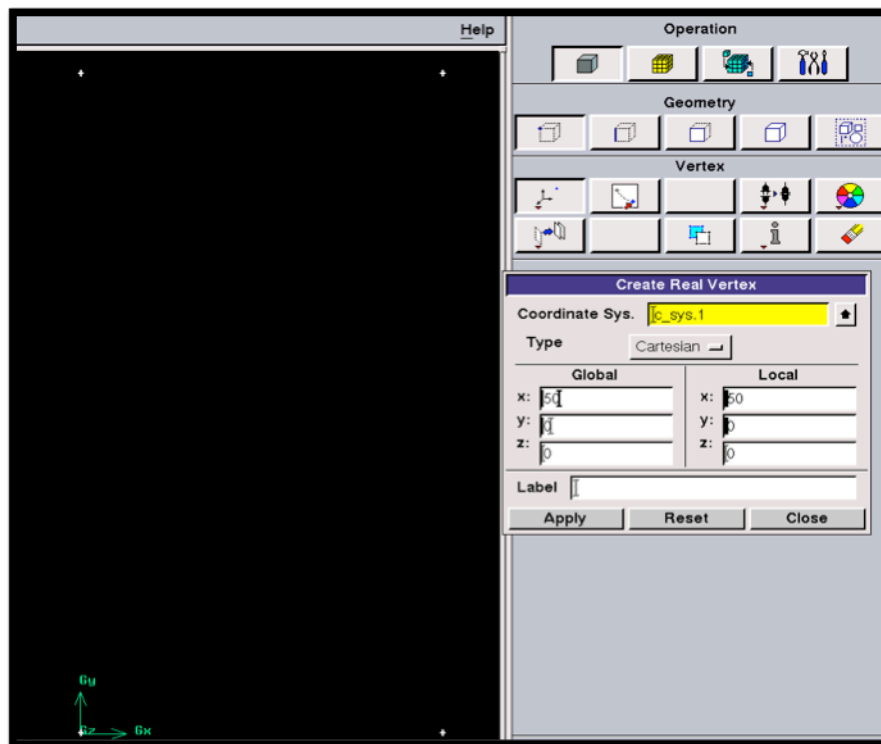


Figura 1.- Introducció de nodes

2) Seleccionar cada parella de nodes que unirem mitjançant una línia. Com es pot observar a la Figura 2 creem línies a partir dels nodes creats anteriorment. S'han de seleccionar els dos nodes que volem unir amb una línia.

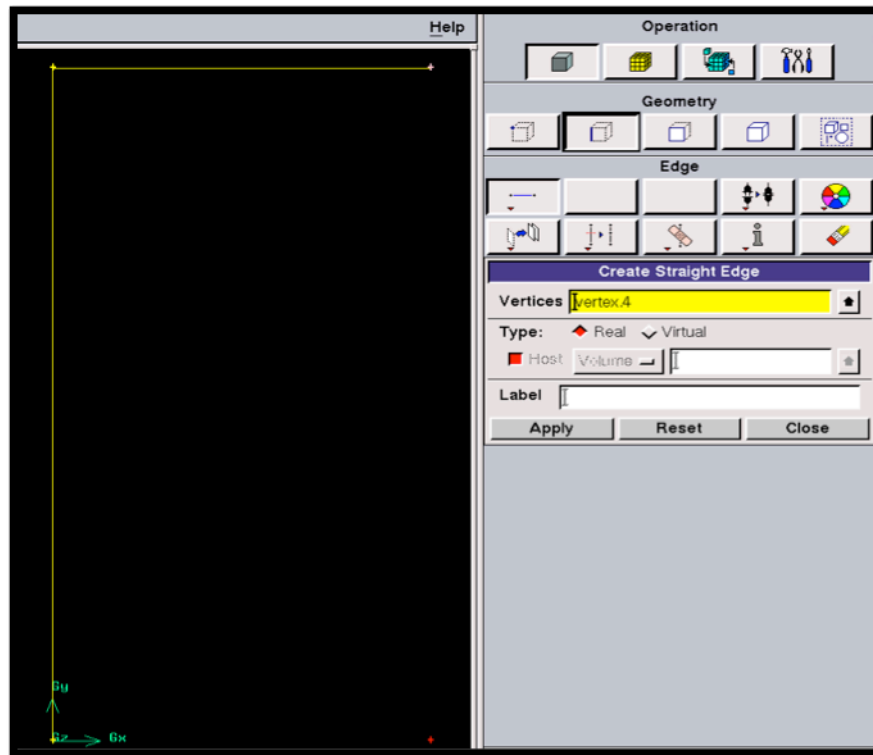


Figura 2.- Creació de línies a partir de nodes

3) Unir les línies per formar una superfície. Com es pot observar a la Figura 3 seleccionem les línies mitjançant les quals volem formar la superfície. Per saber que la superfície està ben realitzada ens haurà de quedar de color blau cel com s'observa a la Figura 4.

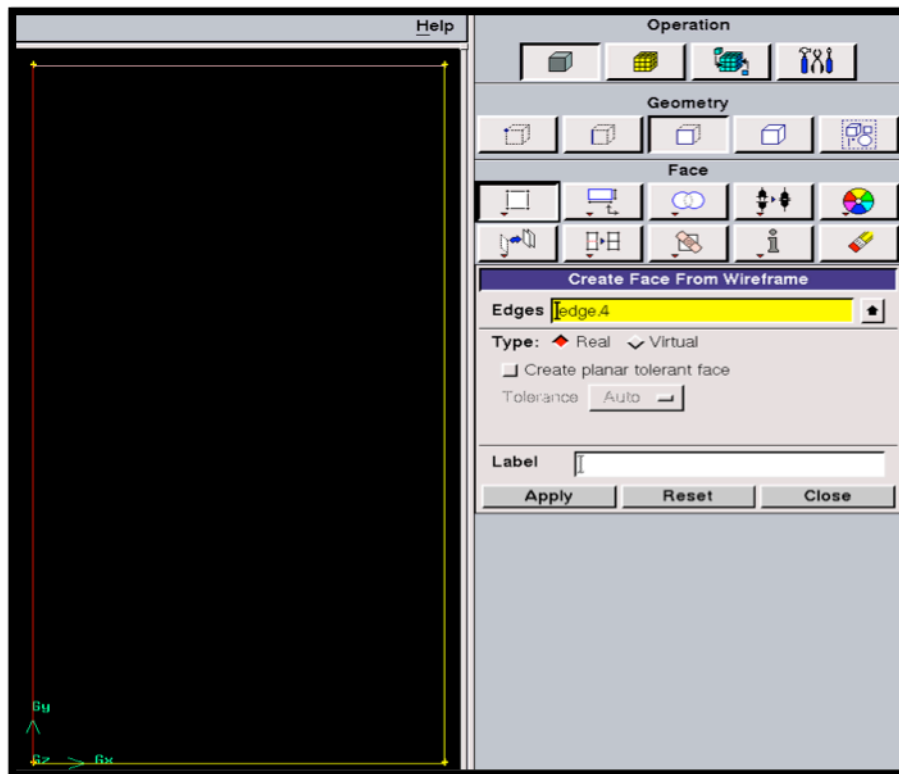


Figura 3.- Unió de les línies per crear una superfície

4) Definició de les condicions de contorn de la superfície. Com podem observar a la Figura 4 es poden definir les condicions de contorn de les parets de la nostra superfície. Aquestes es poden definir de diferents maneres, algunes d'elles són: paret, entrada d'aire, sortida d'aire, entrada de pressió, sortida de pressió, simetria (en el cas que s'hagi creat una figura simètrica a partir d'una de les parets) i entrada de velocitat, entre d'altres.

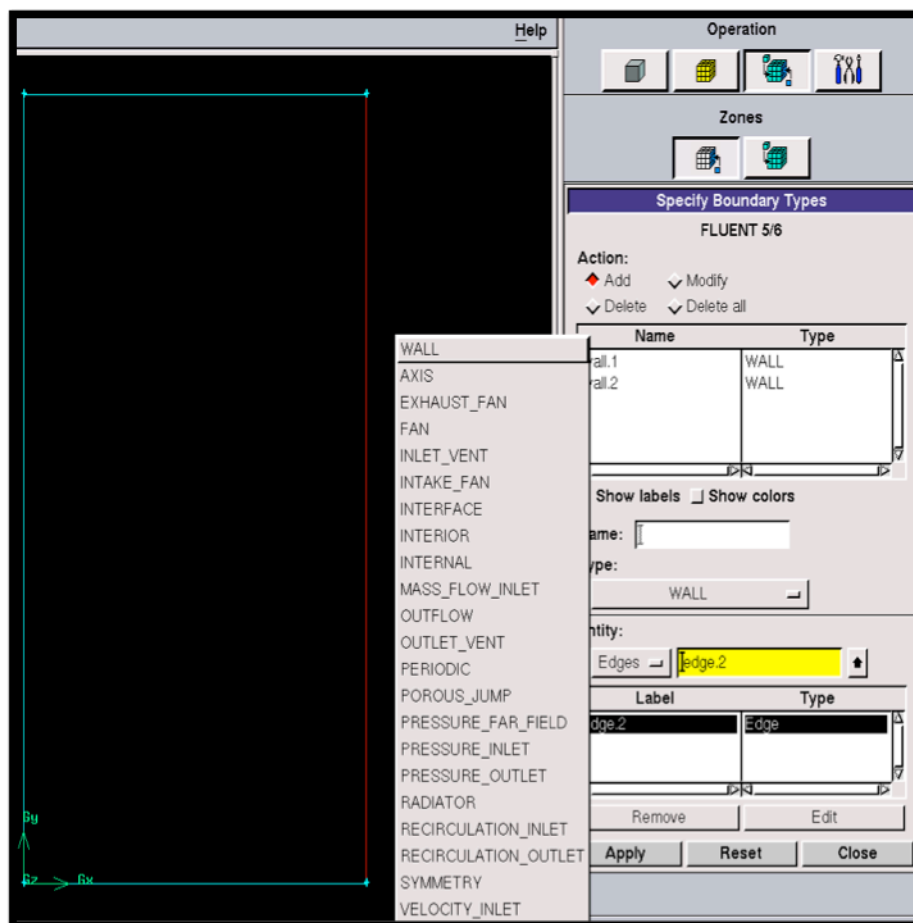


Figura 4.- Configuració dels contorns de la superfície

Un cop la geometria està definida i amb totes les característiques dels controns introduïdes, es passarà a definir el mallat.

A.3 Malla

A l'hora de realitzar una malla s'ha de saber quines seran les dimensions que es vol que tinguin els nostres elements.

S'haurà d'anar al menú de mallar una superfície i ens sortirà una finestra com la de la Figura 5.

S'escollirà el tipus d'element que es vol (triangle o hexaedre) i la seva mida característica (quan més gran sigui aquest número menys elements tindrà el cas)

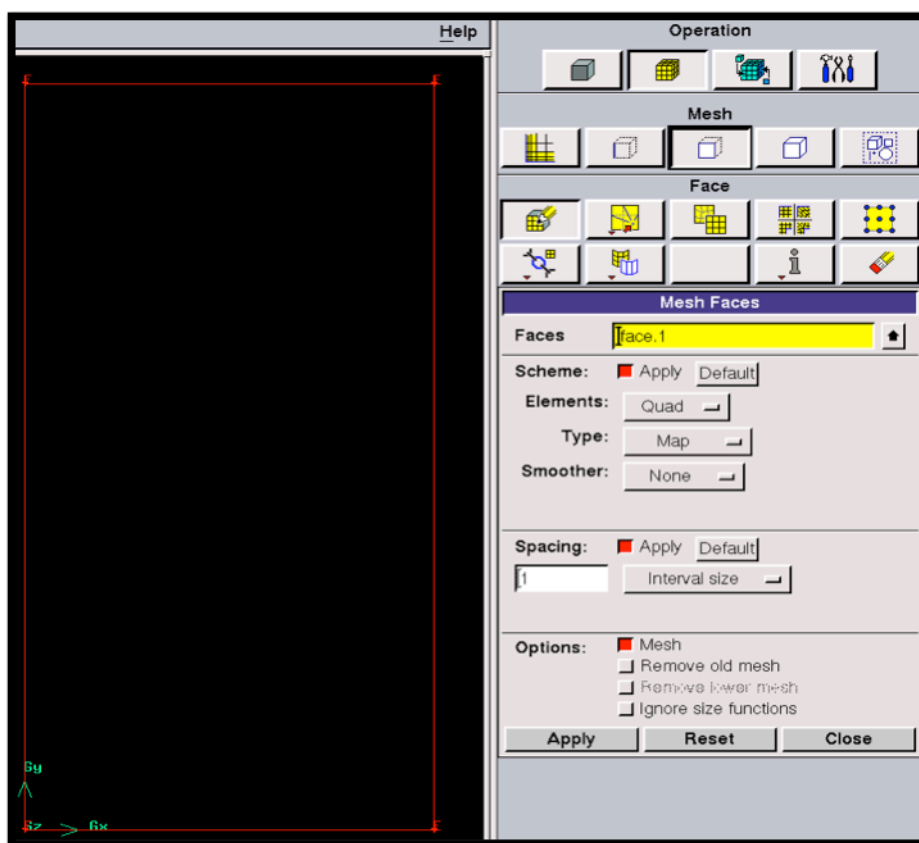


Figura 5.- Configuració del tipus de malla

Un cop executat el mallat es pot veure el tipus de malla que s'ha creat en aquest cas a la Figura 6. En aquest cas, després d'haver creat una superfície de 50x100 unitats i fer un mallat amb un espaiat de 1 unitat es té un mallat amb un total de 5000 cel·les, 10150 cares i 5151 nodes.

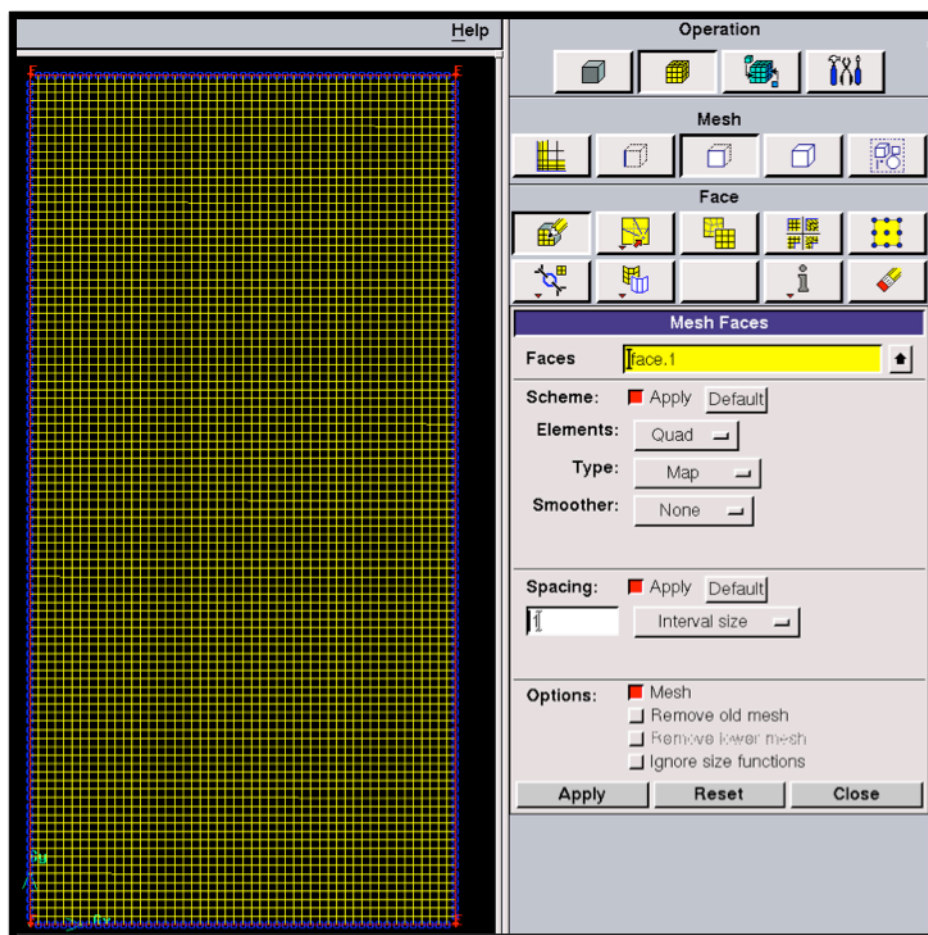


Figura 6.- Mallat

A.4 Simulació

La simulació es començarà obrint el programa seguint els passos descrits a l'Annex B.

Per poder realitzar la simulació amb el FLUENT, s'haurà d'importar la malla que s'ha realitzat amb el GAMBIT. A la Figura 7 es pot veure com queda la malla importada al FLUENT.

A partir d'aquí es pot començar a definir mitjançant la barra d'eines el nostre cas. Algunes de les característiques que s'hauran de definir seran les següents:

- Models: es pot escollir els tipus d'equacions que estaran actives. Com s'observa a la Figura 7, en el cas que s'estudia es vol que l'equació de conservació de l'energia estigui activada ja que volem que l'equació per a l'evolució de la temperatura estigui activada.

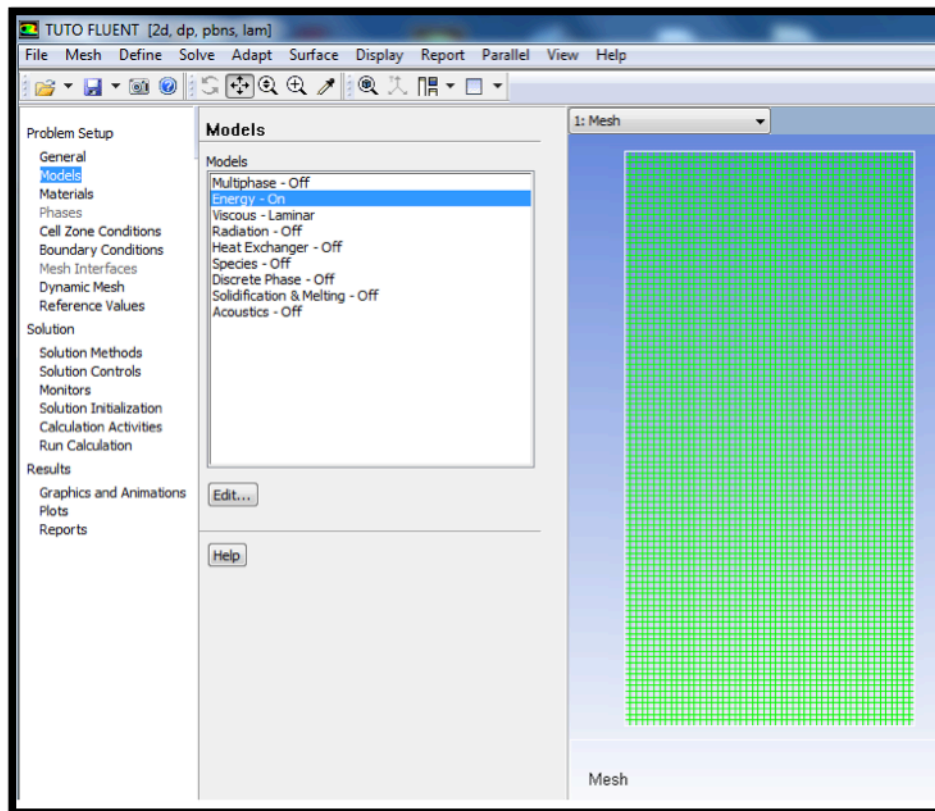


Figura 7.- Edició del models amb el programa ANSYS FLUENT

- Materials: Com es pot observar a la Figura 8 es pot definir el tipus de material que es té, sigui un fluid, un sòlid o un gas. Es pot observar també com en el cas del fluid es poden retocar algunes propietats com la densitat, la viscositat, etc.

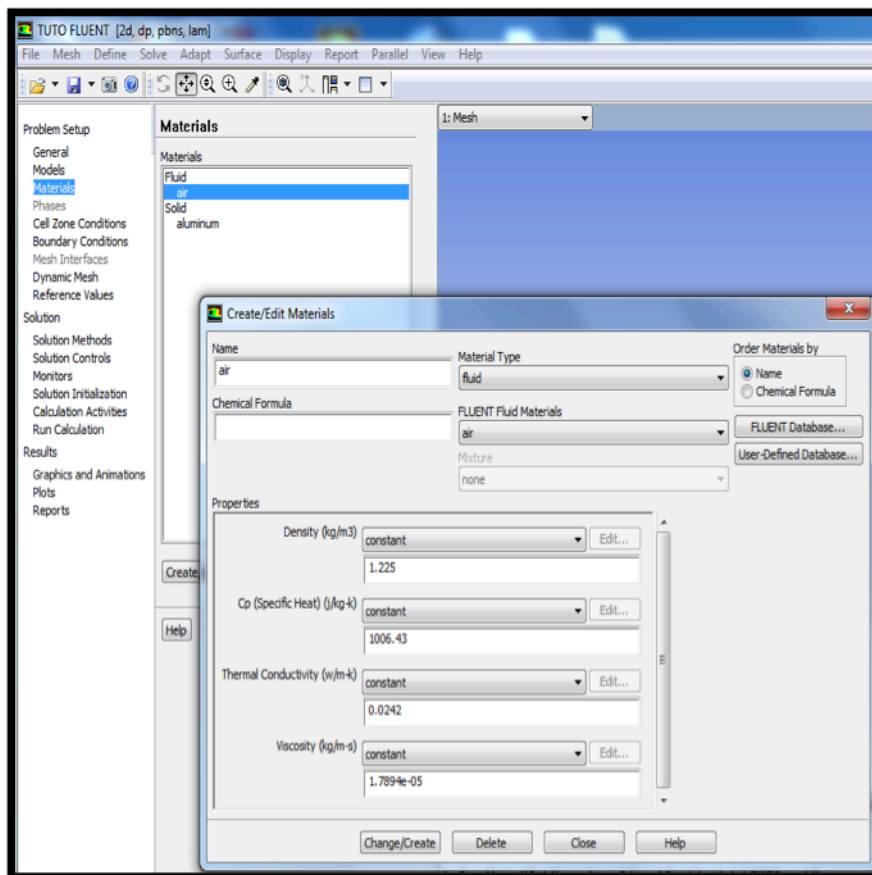


Figura 8.- Edició dels materials amb el programa ANSYS FLUENT

- Cell Zones: podem retocar les condicions de les cel·les interiors. Si tenim UDS podem entrar-les activant el Source Terms tal i com es pot observar a la Figura 9.

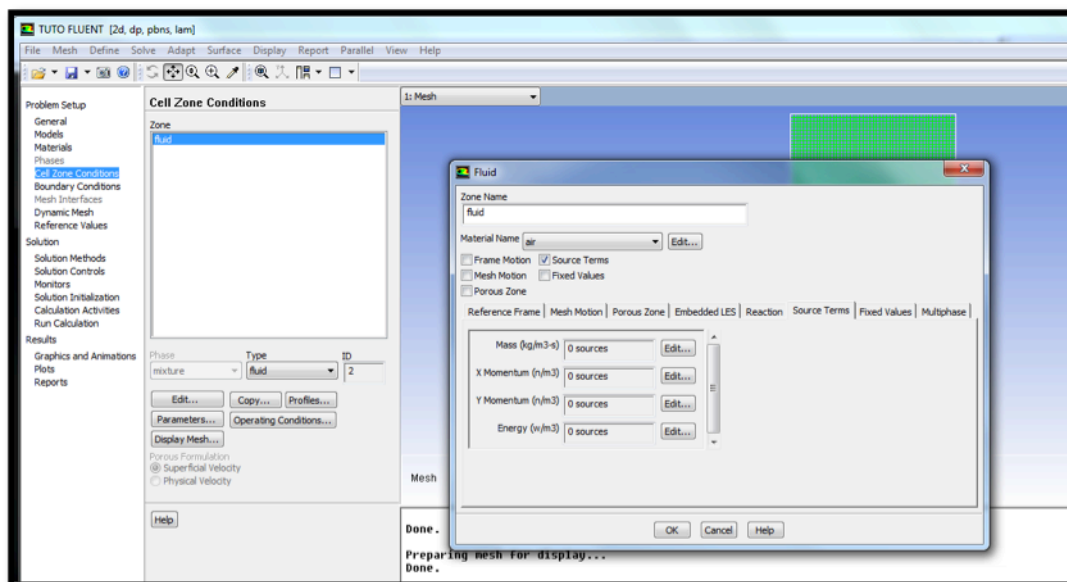


Figura 9.- Edició de les cel·les amb el programa ANSYS FLUENT

- Boundary Conditions: com es pot observar a la Figura 10 aquest menú permet retocar les condicions de contorn de les parets que determinen el domini. Per exemple, en el cas de tenir una paret per on hi entraria un flux de calor, s'hauria d'imposar aquesta condició en aquesta finestra.

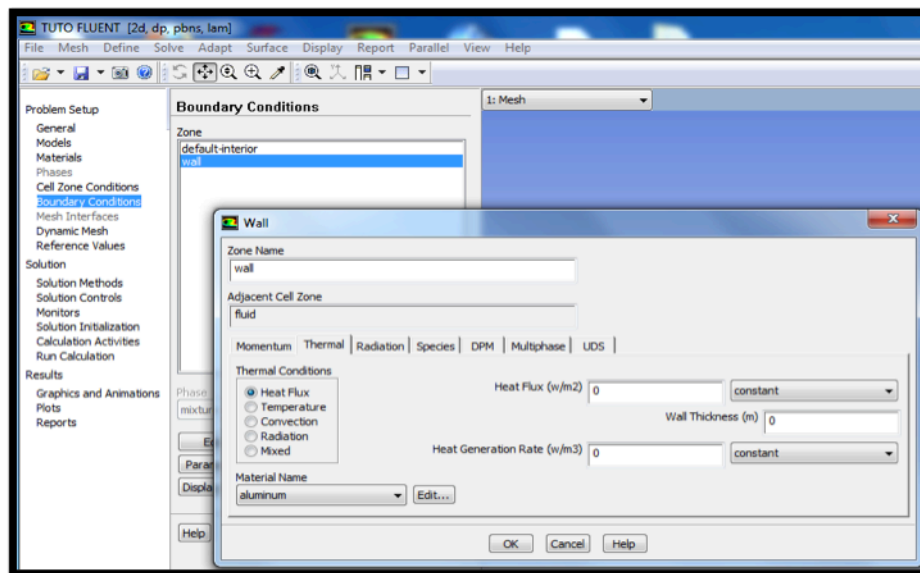


Figura 10.- Edició de les condicions de contorn amb el programa ANSYS FLUENT

- Càrrega del programa en C: per carregar el programa en C s'haurà d'anar al menú de la barra superior: define, user-defined, functions i compiled. S'afegeixen les UDF creades amb el programa en C es guarden a la biblioteca (Build) i es carreguen (Load). En el cas que s'hagués de borrar-ne alguna haurem d'anar al mateix menú que abans però en comptes de compilar posarem manage i es suprimiran totes les UDF i es tornaran a carregar mitjançant el procés descrit anteriorment.

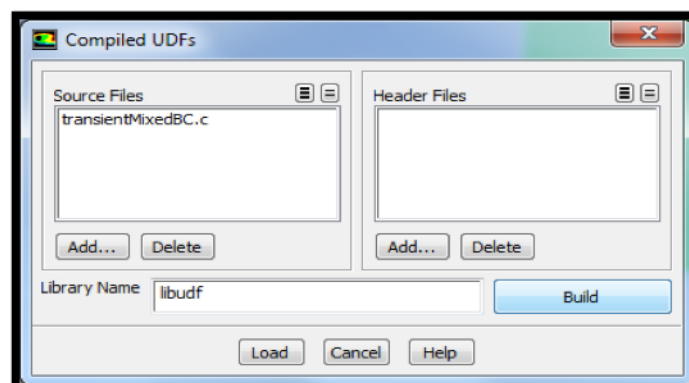


Figura 11.- Compilació de les UDS amb el programa ANSYS FLUENT

Al mateix menú però dins de User-defined s'escollirà Functions Hooks i es desplega el menú on es podrà posar les condicions inicials, ajustos, execucions al final, etc.

Quan es tingui el cas ben defint s'haurà d'inicialitzar la solució al menú Solution, Solution Inicializacion, Initialize. En aquest menú es podran ficar valors inicials com, per exemple, el de la Temperatura.

Un cop inicialitzat, el cas estarà apunt per fer les iteracions necessàries, Number of Iterations. Clicarem Calculate i dins de Solution, Run Calculation.

A.5 Postprocés

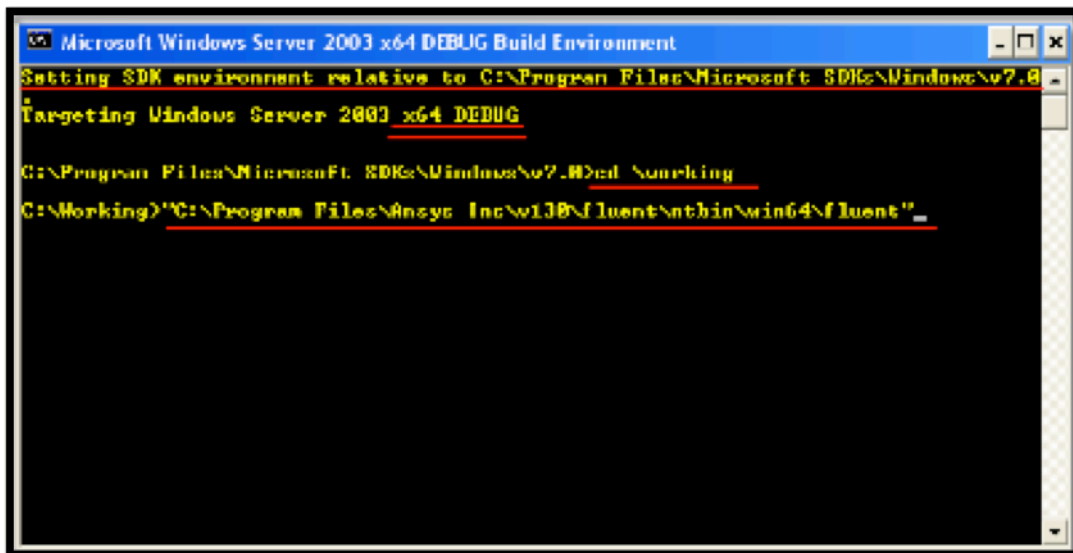
Un cop realitzats els càlculs es podran trobar dos tipus de valors:

1. Qualitatius: gràfics de contorns (distribucions temperatura, velocitat, etc), de vectors, etc.
2. Quantitatius: podrem definir un punt i obtenir valors concrets de temperatura, de velocitat, etc.

B EXECUCIÓ FLUENT PER COMPILAR UDF

S'ha de tenir present que la versió instal·lada per defecte de l'Ansys FLUENT només permet interpretar el codi C però no compilar-lo. Això provoca que les nostres instruccions no estiguin al mateix nivell que el codi original de FLUENT i al·lenteix molt la simulació i, en alguns casos, la fa inviable. Per compilar el codi C s'ha de fer el següent:

- 1) Instal·lar el Microsoft Visual Studio Express Edition (2010)
- 2) Instal·lar el Microsoft Windows SDK per Windows 7 and Net Framework 3,5 SP1
- 3) Executar SDK a partir del Comand Shell. A l'obrir-se s'haurà d'introduir el directori de treball. Si es tingués el directori de treball a l'escriptori s'hauria de ficar la següent adreça: "cd C:\Usuaris\desktop\Directoridetreball" i executem.
- 4) A la següent línia sortirà C:\Usuaris\desktop\Directoridetreball i s'haurà d'introduir "C:\Program Files\Ansys Inc\v130\fluent\ntbin\win64\fluent" perquè s'executi l'Ansys FLUENT.
- 5) Un cop executat l'Ansys s'haurà d'obrir el cas (o bé la malla), que haurà d'estar dins del directori de treball. Igualment, el programa en C haurà d'estar també a dins del directori de treball.



```
Microsoft Windows Server 2003 x64 DEBUG Build Environment
Setting SDK environment relative to C:\Program Files\Microsoft SDKs\Windows\v7.0
Targeting Windows Server 2003 x64 DEBUG
C:\Program Files\Microsoft SDKs\Windows\v7.0>cd .
C:\Working>"C:\Program Files\Ansys Inc\v130\fluent\ntbin\win64\fluent" _
```

Figura 12.- Execució de l'ANSYS FLUENT mitjançant el CMD Shell

C ANNEX UDS

C.1 L'equació general de transport escalar: Discretització i solució

ANSYS FLUENT utilitza una tècnica de control basada en volum finits per convertir una equació escalar general de transport a una algebraica que es pot resoldre numèricament. Aquesta tècnica de volums finits consisteix en la integració de l'equació de transport de cada volum de control, i, per tant, en l'obtenció d'una equació discreta que expressa la llei de conservació sobre tot un volum de control.

La discretització de les equacions de govern es poden il·lustrar més fàcilment considerant l'equació de conservació transitòria per al transport d'una quantitat escalar ϕ . Això es mostra per a la següent equació escrita en forma integral per a un volum de control V arbitrari de la manera següent:

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \oint \rho \phi \vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla \phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV$$

Eq. 1.- Equació transitòria de la conservació de ϕ

on

- ρ = densitat
- \vec{v} = vector velocitat en 2D
- $d\vec{A}$ = vector diferencial d'àrea
- Γ_ϕ = coeficient de difusivitat per ϕ
- $\nabla \phi$ = gradient de ϕ en 2D
- S_ϕ = font de ϕ per unitat de volum

L'Eq. 1 és aplicada a cada volum de control, o cel·la, en un domini computacional. En les dues dimensions, la cel·la triangular com es pot observar a la Figura 13 és un exemple d'un volum de control. La discretització de l'equació Eq. 1 en una cel·la és:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \sum_f^{N_{\text{faces}}} \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_{\text{faces}}} \Gamma_\phi \nabla \phi_f \cdot \vec{A}_f + S_\phi V$$

Eq. 2.- Equació transitòria de la conservació inestable per el transport de ϕ

on

- N_{faces} = nombre de cares que conté la cel·la
- ϕ_f = valor de ϕ per convecció a través de la cara f
- $\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$ = flux de massa a través de la cara
- Γ_ϕ = coeficient de difusivitat per ϕ
- $\nabla\phi$ = gradient de ϕ en 2D
- S_ϕ = font de ϕ per unitat de volum

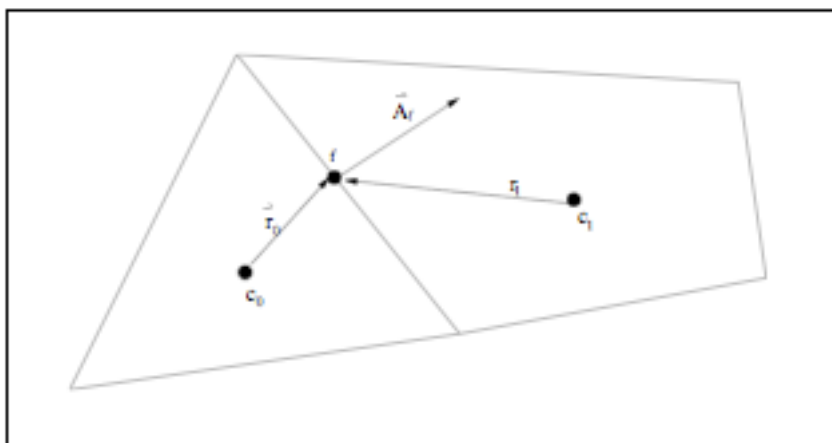


Figura 13.- Volum de control emprat per il·lustrar la discretització d'una equació de transport escalar

C.2 Discretització espacial

Per defecte, ANSYS FLUENT guarda els valors discrets de la magnitud ϕ escalar en els centres de les cel·les (c_0 i c_1 en Figura 13). Els valors ϕ_f són necessaris per als termes convectius de l'Eq. 2 i han de ser interpolats a partir dels valors de les cel·les del centre. Això s'aconsegueix utilitzant diversos mètodes de discretització com, per exemple, el de tipus upwind.

El mètode upwind significa que el valor nominal ϕ_f es deriva de les quantitats en la cel·la d'aigües amunt, o contra el vent, respecte a la direcció de la velocitat normal (v_n) en l'Eq. 2. L'ANSYS FLUENT permet escollir entre diversos mètodes de discretització

D ANNEX UDF

D.1 Objectiu d'ús de les UDFs?

Les UDFs permeten personalitzar l'ANSYS FLUENT per satisfer les necessitats particulars de la simulació. Les UDF es poden utilitzar per a una gran varietat d'aplicacions. Alguns exemples són els següents:

- Personalització de les condicions de contorn, definicions de les propietats del material, superfície i volum, termes font en les equacions de transport d'ANSYS FLUENT, termes font per a les equacions escalars definides per l'usuari (UDS), etc..
- Ajustos dels valors calculats una vegada per iteració.
- La inicialització d'una solució.
- L'execució al final d'una iteració, en sortir d'ANSYS FLUENT, d'un compilat amb la biblioteca d'UDFs.
- Millora del postprocessat.
- Millora dels actuals models d'ANSYS FLUENT.

D.2 Terminologia del mallat

Aquesta terminologia és la que utilitza el solver d'ANSYS FLUENT per accedir a les UDFs. Com que les dades a resoldre es defineixen en termes dels components de la malla, s'haurà d'aprendre la terminologia bàsica de la malla abans de poder escriure una UDF.

Una malla es divideix en volums de control, o cel·les. Cada cel·la està definida per un conjunt de nodes, un centre de la cel·la, i les cares que limiten la cel·la com es pot observar a la Figura 14 que es troba a continuació. ANSYS FLUENT utilitza estructures internes de dades per definir el domini de la malla, per assignar una ordre a les cel·les, les cares de cel·les, i els nodes en una malla, i per establir la connectivitat entre les cel·les adjacents.

Un fil (o thread) és una estructura de dades en ANSYS FLUENT que s'utilitza per emmagatzemar informació sobre una frontera o zona de cel·la. Els punters a les estructures de dades de fil es passen sovint a les funcions per accedir a la informació sobre les zones de frontera o de cel·les representades per a cada fil. Cada frontera o zona de cel·les que es

defineix en el model d'ANSYS FLUENT té una ID de zona que és un nombre enter que s'associa amb les dades contingudes dins de la zona.

Les cel·les i les cares de cel·les s'agrupen en zones que normalment defineixen els components físics del model (per exemple, entrades, sortides, les parets, les regions de fluid). Una cara pot tenir una o dues cel·les, depenent de si es tracta d'una cara dels contorns o d'una cara interior.

Un domini és una estructura de dades en ANSYS FLUENT que s'utilitza per emmagatzemar informacions sobre una col·lecció de nodes, els fils i les de cel·les en una malla.

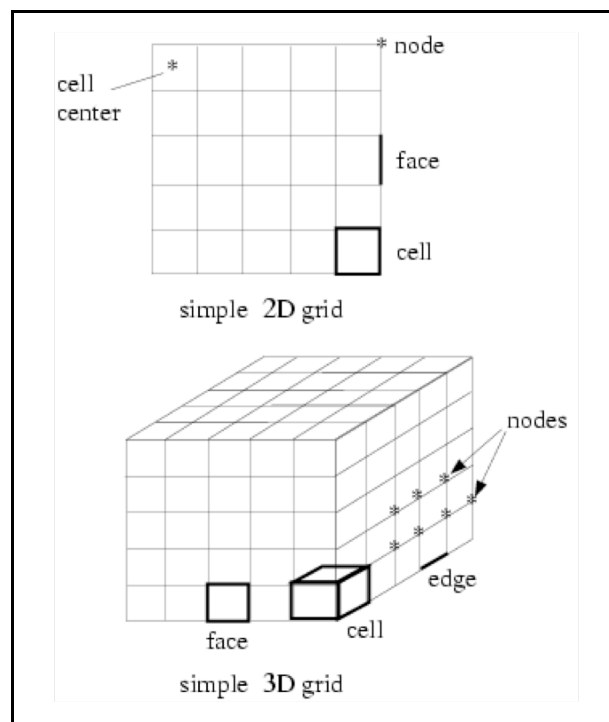


Figura 14.- Terminologia del mallat

D.3 Tipus de dades en ANSYS FLUENT

A més dels tipus de dades estàndard del llenguatge en C que es pot utilitzar per definir les dades de les UDFs, hi ha tipus de dades específiques a ANSYS FLUENT que s'associen amb les dades del programa. Aquests tipus de dades representen les unitats de càlcul per a una malla (Figura 14). Les variables que es defineixen en l'ús d'aquests tipus de dades es subministren normalment com a arguments per definir macros, així com per a altres funcions especials d'accés a les dades d'ANSYS FLUENT .

Alguns dels tipus de dades més utilitzats són:

- Node: El node és un tipus d'estructura de dades que emmagatzema les dades associades amb un punt de malla.
- Face_t (o cara): és un tipus de dades integral que identifica una cara en particular dins d'un fil de la cara
- Cell_t (o cel·la): és un tipus de dades integral que identifica una cel·la en particular dins d'un fil de la cel·la.
- Thread (o fil): El fil és un tipus d'estructura de dades que emmagatzema les dades que són comunes al grup de les cel·les o a les cares que representa. Per a aplicacions multifase, hi ha una estructura de fil per a cada fase, així com per a la barreja.
- Domini: és un tipus d'estructura de dades que emmagatzema les dades associades a un conjunt de nodes, la cara i els fils de cel·les en una malla. Per a aplicacions monofàsiques, només hi ha una estructura de domini únic. Per a aplicacions multifase, hi ha estructures de domini per a cada fase, la interacció entre les fases, així com per a la barreja.

Quan s'utilitza una UDF en ANSYS FLUENT, la funció que s'utilitza pot accedir a les variables de la solució en les cel·les individuals o a les cares de cel·les en el fluid i a les zones de frontera. Les UDF cal que siguin passades a arguments apropiats com ara un fil de referència (és a dir, un punt a un fil en particular).

Algunes UDF passen la variable de l'índex de les cel·les (c) com un argument (com en DEFINE_PROPERTY (funcio, c, t)), o la variable d'índex de la cara (F) (per exemple, en DEFINE_UDS_FLUX (funcio, f, t, i)). Si la cel·la o l'índex variable de la cara (per exemple, cell_t c, face_t f) no es passa com un argument i es necessita en la UDF, la variable està sempre disponible per ser utilitzada per a la funció després que hagi estat declarada localment.

Les estructures de dades que es passen a la UDF (com punts) depenen de la DEFINE macro que s'està utilitzant i la propietat o el terme que s'està intentant modificar. Per exemple, UDF DEFINE_ADJUST són funcions de propòsit general que es passen el domini (d) (tal com en DEFINE_ADJUST (funcio, d)).

Algunes UDFs (com les funcions DEFINE_ON_DEMAND) no passen els punters a les estructures de dades, mentre que altres no passen el punter que les UDFs necessiten. Si la

UDF necessita tenir accés a un fil o un domini que no es passa directament pel solver del programa a través d'un argument, llavors s'haurà de modificar l'ANSYS FLUENT. Per exemple, DEFINE_ADJUST passa només el punter de domini, així que si la UDF necessita un indicador de pas, haurà de declarar la variable a nivell local i després obtenir-amb la macro especial Lookup_Thread.

Com un altre exemple, si s'està utilitzant DEFINE_ON_DEMAND (que no passa cap argument punter) per executar una UDF i la UDF necessita un punter de domini, la funció haurà de declarar el domini local variable i obtenir-lo utilitzant la instrucció Get_Domain.

E PROGRAMA EN C PER EL CAS 1

```
/*=====*/
/*          PROGRAMA DE COMBUSTIÓ          */
/*                                          */
/*=====*/
#include "udf.h"
#include "sg.h"
/*=====*/
/*          Condicions Inicials          */
/*                                          */
/*=====*/
DEFINE_INIT(cond_ini,d)
{
    cell_t c;
    Thread *t;
    real xc[ND_ND];
    /* loop over all cell threads in the domain */
    thread_loop_c(t,d)
    {
        /* loop over all cells */
        begin_c_loop_all(c,t)
        {
            C_CENTROID(xc,c,t);
            if((xc[1]<0.025) && (xc[0]>0.025))
            {
                C_U(c,t)=0.;
                C_V(c,t)=0.;
                C_T(c,t)=1000.;
                C_YI(c,t,0)=0.7;
            }
        }
    }
}
```



```
        C_YI(c,t,1)=0.;
    }
else
    {
    C_U(c,t)=0.;
    C_V(c,t)=0.;
    C_T(c,t)=300.;
    C_YI(c,t,0)=0.;
    C_YI(c,t,1)=0.23;
    }

}
end_c_loop_all(c,t)
}
}
/*=====*/
/*      Fí Condicions Inicials      */
/*                                  */
/*=====*/
```

```

/*=====*/
/*      Mixed Oxigen      */
/*      */
/*=====*/
/*=====*/
/*      Unsteady mixed boundary condition per Yo      */
/*      q = hC ( phi - PHI_inf )      */
/*=====*/

real xc[ND_ND];
real mdot;
DEFINE_EXECUTE_AT_END(valor_m)
{
    Domain *d;
    Thread *t;
    cell_t c;
    d=Get_Domain(1);
    thread_loop_c(t,d)
    {
        begin_c_loop_all(c,t)
        {
            mdot = 100.*1.823e-6*430.;
        }
        end_c_loop_all(c,t)
    }
}

/* Names of the user-defined scalar to be used */
DEFINE_PROFILE(mixedoxygen, thread, nv)
{
    /* constants must be specified correctly for the mixed BC */
    real hC, PHI1_inf;

```

```
/* extern real mdot; */
face_t f;

real xc[ND_ND];
real A[ND_ND], dG[ND_ND], dr0[ND_ND], es[ND_ND], dr, A_by_es;
real Af;
real beta0, gamma;
real temp1, temp2;
real aux2;

Thread *t0=thread->t0;
PHI1_inf=0.;
gamma=1.2e-5;
begin_f_loop(f, thread)
{
  /* identify the cell thread adjacent to the face thread f */
  cell_t c0 = F_C0(f, thread);

  BOUNDARY_FACE_GEOMETRY(f, thread, A, dr, es, A_by_es, dr0);
  Af=NV_MAG(A);
  F_CENTROID(xc,f,thread);
  {
    if(xc[0]<0.025)
      hC = 0.;
    else
      hC = mdot;
    /* hC =100.*1.823e-6*430.*(0.05-xc[0])/0.025;*/
  }
  if (NULLP(T_STORAGE_R_NV(t0, SV_Y_I(1)+SV_Y_0_G-SV_Y_0)))
    beta0=0; /* if gradient is not allocated and stored yet, bypass
```

```

the following macro (it happens when case/data files are being read */
else
    BOUNDARY_SECONDARY_GRADIENT_SOURCE(beta0,    SV_Y_I(1)+SV_Y_0_G-
SV_Y_0,dG, es, A_by_es, gamma);
/* temporary variables used in the profile expression */
temp1=gamma*A_by_es/dr;
temp2=hC*Af;

aux2 = (temp1*C_YI(c0, t0, 1)- beta0 + temp2*PHI1_inf)/(temp2 + temp1);
    if(aux2 > 0.)
        if(aux2 > 1.)
            F_PROFILE(f, thread, nv) = 1.;
        else
            F_PROFILE(f, thread, nv) = aux2;
    else
        F_PROFILE(f, thread, nv) = 0.;
}
end_f_loop(f, thread)
}
/*=====*/
/*          Definició dels termes font          */
/*          Per Yf => font_fue                    */
/*          Per Yo => font_oxigen                 */
/*          Per T => font_temp                    */
/*=====*/
DEFINE_SOURCE(font_fuel,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;

    source=-
1.e+7*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI(cell,thread,1)*exp(-
100000./(8.314*C_T(cell,thread)));

```

```

        ds[eqn]=-1.e+7*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,1)*exp(-
100000./(8.314*C_T(cell,thread)));
        return source;
    }
DEFINE_SOURCE(font_oxigen,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;

    source=-
1.185*1.e+7*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI(cell,thread,1)*exp(-
100000./(8.314*C_T(cell,thread)));

    ds[eqn]=-1.185*1.e+7*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*exp(-
100000./(8.314*C_T(cell,thread)));

    return source;
}
DEFINE_SOURCE(font_temp,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;

    source=10*16.e+6*1.e+7*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI
(cell,thread,1)*exp(-100000./(8.314*C_T(cell,thread)));

    ds[eqn]=10*16.e+6*1.e+7*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_Y
I(cell,thread,1)*100000./(8.314*C_T(cell,thread))*C_T(cell,thread))*exp(-
100000./(8.314*C_T(cell,thread)));

    return source;
}
/*=====*/
/*          Fí Mixed Oxigen          */
/*          */
/*=====*/

```

```

/*=====*/
/*      Mixed Fuel      */
/*      */
/*=====*/
/*****/
/*      Implementation of the mixed      */
/*      boundary condition for a UDS (or multiple):      */
/*       $q = hC (\phi - \text{PHI\_inf})$       */
/*****/
/* Names of the user-defined scalar to be used */
DEFINE_PROFILE(mixedfuel, thread, nv)
{
    /* constants must be specified correctly for the mixed BC */
    real hC, PHI1_inf;
    /*extern real mdot;*/
    face_t f;

    real xc[ND_ND]; /* aixÚ Ès nou - Toni */
    real A[ND_ND], dG[ND_ND], dr0[ND_ND], es[ND_ND], dr, A_by_es;
    real Af;
    real beta0, gamma;
    real temp1, temp2;
    real aux2;

    Thread *t0=thread->t0;
    /*hC=1.e-4; anulΣlat ja que ho faig abaix (Toni)*/
    PHI1_inf=1.;
    gamma=1.2e-5;
    begin_f_loop(f, thread)

```

```

{
/* identify the cell thread adjacent to the face thread f */
cell_t c0 = F_C0(f, thread);
BOUNDARY_FACE_GEOMETRY(f, thread, A, dr, es, A_by_es, dr0);
Af=NV_MAG(A);
    F_CENTROID(xc,f,thread);
        if(xc[0]<0.025)
            hC = 0.;
        else
            hC= 100.*1.823e-6*430.;
        /*    hC =mdot(f,thread); 100.*1.823e-6*430.*(0.05-xc[0])/0.025;*/
if (NULLP(T_STORAGE_R_NV(t0, SV_Y_I(0)+SV_Y_0_G-SV_Y_0)))
    beta0=0; /* if gradient is not allocated and stored yet, bypass
        the following macro (it happens when case/data files are being read */
else
    BOUNDARY_SECONDARY_GRADIENT_SOURCE(beta0,    SV_Y_I(0)+SV_Y_0_G-
SV_Y_0,dG, es, A_by_es, gamma);
/* temporary variables used in the profile expression */
temp1=gamma*A_by_es/dr;
temp2=hC*Af;

    aux2 = (temp1*C_YI(c0, t0, 0)- beta0 + temp2*PHI1_inf)/(temp2 + temp1);
if(aux2 > 0.)
    if(aux2 > 1.)
        F_PROFILE(f, thread, nv) = 1.;
    else
        F_PROFILE(f, thread, nv) = aux2;
else
    F_PROFILE(f, thread, nv) = 0.;
}
end_f_loop(f, thread)

```



```
/*=====*/
/*          Temperatura de Superfície          */
/*                                          */
/*=====*/
DEFINE_PROFILE(temp_surf,t,i)
{
    real x[ND_ND];
    face_t f;
    begin_f_loop(f,t)
    {
        F_CENTROID(x,f,t);
        if(x[0]<0.025)
            F_PROFILE(f,t,i) = 300.;
        else
            F_PROFILE(f,t,i) = 620.;
    }
    end_f_loop(f,t)
}
/*=====*/
/*          Fí Temperatura Superfície          */
/*                                          */
/*=====*/
```

```
/*=====*/
/*          Velocitat Ajustable Combinada          */
/*          */
/*=====*/
DEFINE_ADJUST(vel_adjust_comb,d)
{
    cell_t c;
    Thread *t;
    real xc[ND_ND];

    thread_loop_c(t,d)
    {
        begin_c_loop_all(c,t)
        {
            if(C_UDSI(c,t,0)<0.)
                C_UDSI(c,t,0)=0.;
            if(C_UDSI(c,t,1)<0.)
                C_UDSI(c,t,1)=0.;
            C_CENTROID(xc,c,t);
            if((xc[1]<0.001)&&(xc[0]>0.025))
                C_U(c,t)=0.;
                C_V(c,t)=100.*1.823e-6*430./1.2*(0.05-xc[0])/0.025;
        }
        end_c_loop_all(c,t)
    }
}
/*=====*/
/*          Fí Velocitat Ajustable Combinada          */
/*          */
/*=====*/
```

F PROGRAMA EN C PER EL CAS 2

```

/*=====*/
/*
          Programa transient
          */
/*=====*/

#include "udf.h"

#include "sg.h" /* needed for the secondary gradient source macro */

#define densref 640.          /* densitat de referència (kg m-3) */
#define densmin 50.          /* densitat mínima del sòlid (kg m-3) */
#define as 7.8e16            /* terme preexponencial sòlid (s-1) */
#define eas 249500.          /* energia d'activació sòlid (J mol-1) */
#define rgas 8.314           /* constant del gas ideal (J K-1 mol-1) */
#define cs 1256.             /* calor específica sòlid (J K-1 Kg-1) */
#define tinf 300.            /* temperatura ambient (K) */
#define yoinf 0.244          /* fracció massica oxigen ambient (-) */
#define tvap 720.            /* temperatura vaporitzacio (K) */
#define condgas 0.025        /* conductivitat gas (W K-1 m-1) */
#define condsol 0.12         /* conductivitat solid (W K-1 m-1) */
#define tau 0.0001           /* meitat del gruix de la mostra (m) */
#define calorlatent -368000. /* calor latent (J kg-1) */
#define difus 1.2e-5         /* difusivitat (m kg-1 s-1) */

#define ag 1.58e11           /* terme preexponencial gas (m3 kg-1 s-1) */
#define eag 120000.          /* energia d'activació gas (J mol-1) */
#define qc 16.51e+6          /* calor de combustió de la fase gas (J kg-1) */
#define cest 1.185           /* coeficient estequiomètric fuel/oxigen */

```

```

/*=====*/
/*          Definició dels termes font          */
/*          Per Yf => font_fuel                    */
/*          Per Yo => font_oxigen                  */
/*          Per T => font_temp                     */
/*          Per Ts => temperatura sòlid           */
/*          Per rhos => font_densolid              */
/*=====*/

DEFINE_SOURCE(font_fuel,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;

    source=-
    ag*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI(cell,thread,1)*exp(-
    eag/(rgas*C_T(cell,thread)));

    ds[eqn]=-ag*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,1)*exp(-
    eag/(rgas*C_T(cell,thread)));

    return source;
}

DEFINE_SOURCE(font_oxigen,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;

    source=-
    cest*ag*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI(cell,thread,1)*exp(-
    eag/(rgas*C_T(cell,thread)));

    ds[eqn]=-cest*ag*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*exp(-
    eag/(rgas*C_T(cell,thread)));

    return source;
}

DEFINE_SOURCE(font_temp,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;

    source=qc*ag*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI(cell,thread
    ,1)*exp(-eag/(rgas*C_T(cell,thread)));
}

```

```

        ds[eqn]=qc*ag*C_R(cell,thread)*C_R(cell,thread)*C_YI(cell,thread,0)*C_YI(cell,thread,1)*eag/(rgas*C_T(cell,thread)*C_T(cell,thread))*exp(-eag/(rgas*C_T(cell,thread)));
        return source;
    }
DEFINE_SOURCE(font_densolid,cell,thread,ds,eqn)
{
    real source;
    real m_f;
    real tref;
/*
    {
        if(C_T(cell,thread)>tvap)
            tref=tvap;
        else
            tref=C_T(cell,thread);
    }*/
    tref=tvap;
    m_f = sqrt((densref*tref*tref*as*condsol*rgas)/(eas*(3.615*(-calorlatent)+4.605*cs*(tref-tinf))))*exp(-eas/(2.*rgas*tref));
    source=-m_f*C_R(cell,thread)/tau;
    ds[eqn]=0.;
    /*Message("a thread %g\n",-m_f/tau); */

    return source;
}
/*=====*/
/*
                                Fi definició dels termes font
*/
/*=====*/

```

```

/*=====*/
/*          Unsteady mixed boundary condition per Yo          */
/*          q = hC ( phi - PHI_inf )                          */
/*=====*/
DEFINE_PROFILE(mixedoxygen, thread, nv)
{
  /* constants must be specified correctly for the mixed BC */
  /* ===== */
  face_t f;
  real xc[ND_ND];    /* AixÚ Ès nou (Toni) */
  real A[ND_ND], dG[ND_ND], dr0[ND_ND], es[ND_ND], dr, A_by_es;
  real Af;
  real beta0, gamma;
  real temp1, temp2;
  real aux2, m_dot;
  Thread *t0=thread->t0;
  gamma=difus;
  begin_f_loop(f, thread)
  {
    /* identify the cell thread adjacent to the face thread f */
    cell_t c0 = F_C0(f, thread);
    BOUNDARY_FACE_GEOMETRY(f, thread, A, dr, es, A_by_es, dr0);
    Af=N*_MAG(A);
    if (NULLP(T_STORAGE_R_NV(t0, SV_Y_I(1)+SV_Y_1_G-SV_Y_1)))
      beta0=0.; /* if gradient is not allocated and stored yet, bypass
      the following macro (it happens when case/data files are being read */
    else
      BOUNDARY_SECONDARY_GRADIENT_SOURCE(beta0,    SV_Y_I(1)+SV_Y_1_G-
      SV_Y_1,dG, es, A_by_es, gamma);
    /* temporary variables used in the profile expression */

```

```
temp1=gamma*A_by_es/dr;
aux2 = (temp1*C_YI(c0, t0, 1)- beta0)/temp1;
  if(aux2 > 0.)
    if(aux2 > 1.)
      F_PROFILE(f, thread, nv) = 1.;
    else
      F_PROFILE(f, thread, nv) = aux2;
  else
    F_PROFILE(f, thread, nv) = 0.;
}
end_f_loop(f, thread)
}
/* ===== */
/*           Fi Mixed Boundary Condition per Yo           */
/* ===== */
```

```

/*=====*/
/*          Unsteady mixed boundary condition per Yf          */
/*          q = hC ( phi - PHI_inf )                          */
/*=====*/
DEFINE_PROFILE(mixedfuel, thread, nv)
{
  /* constants must be specified correctly for the mixed BC */
  real hC, PHI1_inf;
  /* ===== */
  face_t f;
  real A[ND_ND], dG[ND_ND], dr0[ND_ND], es[ND_ND], dr, A_by_es;
  real Af;
  real beta0, gamma;
  real temp1, temp2;
  real aux2, m_dot;
  Thread *t0=thread->t0;
  PHI1_inf=1.;
  gamma=difus;
  begin_f_loop(f, thread)
  {
    /* identify the cell thread adjacent to the face thread f */
    cell_t c0 = F_C0(f, thread);
    BOUNDARY_FACE_GEOMETRY(f, thread, A, dr, es, A_by_es, dr0);
    Af=NV_MAG(A);
    hC = sqrt((densref*C_T(c0,t0)*C_T(c0,t0)*as*condsol*rgas)/(eas*(3.615*(-
    calorlatent)+4.605*cs*(C_T(c0,t0)-tinf))))*exp(-eas/(2.*rgas*C_T(c0,t0)));
    if (NULLP(T_STORAGE_R_NV(t0, SV_Y_I(0)+SV_Y_0_G-SV_Y_0)))
      beta0=0.; /* if gradient is not allocated and stored yet, bypass
    the following macro (it happens when case/data files are being read */
    else

```

```

    BOUNDARY_SECONDARY_GRADIENT_SOURCE(beta0, SV_Y_I(0)+SV_Y_0_G-
SV_Y_0,dG, es, A_by_es, gamma);
/* temporary variables used in the profile expression */
temp1=gamma*A_by_es/dr;
temp2=hC*Af;
aux2 = (temp1*C_YI(c0, t0, 0)- beta0 + temp2*PHI1_inf)/(temp2 + temp1);
    if(aux2 > 0.)
        if(aux2 > 1.)
            if(C_UDSI(c0,t0,0)<=densmin)
                F_PROFILE(f, thread, nv) = 0.;
            else
                F_PROFILE(f, thread, nv) = 1.;
        else
            if(C_UDSI(c0,t0,0)<=densmin)
                F_PROFILE(f, thread, nv) = 0.;
            else
                F_PROFILE(f, thread, nv) = aux2;
        else
            F_PROFILE(f, thread, nv) = 0.;
    }
end_f_loop(f, thread)
}
/* ===== */
/*           Fi Mixed Boundary Condition per Yf           */
/* ===== */

```

```

/*=====*/
/*          Define profile per a het generation rate m_f          */
/*=====*/
DEFINE_PROFILE(m_f, thread, i)
{
  real m_f;
  face_t f;
  Thread *t0=thread->t0;
  begin_f_loop(f, thread)
    cell_t c0 = F_C0(f, thread);
    {
      m_f      =      sqrt((densref*C_T(c0,t0)*C_T(c0,t0)*as*condsol*rgas)/(eas*(3.615*(-
calorlatent)+4.605*cs*(C_T(c0,t0)-tinf))))*exp(-eas/(2.*rgas*C_T(c0,t0)));
      F_PROFILE(f,thread,i) = m_f*calorlatent/tau;
    }
  end_f_loop(f, thread)
}
/*=====*/
/*          Fi Define profile per a m_f          */
/*=====*/

```

```
/*=====*/
/*          Define profile T_f          */
/*=====*/
DEFINE_PROFILE(T_f, thread, i)
{
    face_t f;
    Thread *t0=thread->t0;
    real T_f;
    begin_f_loop(f, thread)
        cell_t c0 = F_C0(f, thread);
        {
            T_f = C_T(c0,t0);
            F_PROFILE(f,thread,i) = T_f;
        }
    end_f_loop(f, thread)
}
/*===== */
/*          Fi Define profile per a T_f          */
/*===== */
```

```

/*=====*/
/*          Definició ADJUST          */
/*=====*/
DEFINE_ADJUST(vel_y,d)
{
    face_t f;
    cell_t c;

    real xc[ND_ND];
    real m_f;
    real tref;
    int ID = 8;
    Thread *t0 = Lookup_Thread(d,ID);
    /*loop over all cell threads in the domain */

    thread_loop_c(t0,d)
    {
        /* loop over all cells */
        begin_c_loop_all(c,t0)
        {
            C_CENTROID(xc,c,t0);
            if(xc[1]<0.005)
            {
                if(C_T(c,t0)>tvap)
                    tref=tvap;
                else
                    tref=C_T(c,t0);
            }

            m_f = sqrt((densref*tref*tref*as*condsol*rgas)/(eas*(3.615*(-
calorlatent)+4.605*cs*(tref-tinf)))*exp(-eas/(2.*rgas*tref)));

```

```
        C_V(c,t0)=m_f/C_R(c,t0);
    }
    end_c_loop_all(c,t0)
}

/*=====*/
/*          Fi definici  ADJUST          */
/*=====*/
```

```
/* ===== */
/*          Condicions inicials          */
/* ===== */
DEFINE_INIT(cond_ini,d)
{
    cell_t c;
    Thread *t;
    real xc[ND_ND];

    /* loop over all cell threads in the domain */
    thread_loop_c(t,d)
    {
        /* loop over all cells */
        begin_c_loop_all(c,t)
        {
            C_CENTROID(xc,c,t);
            if((xc[1]<0.005) && (xc[0]>0.08))
            {
                C_U(c,t)=0.;
                C_V(c,t)=0.;
                C_T(c,t)=1000.;
                C_YI(c,t,0)=0.7;
                C_YI(c,t,1)=0.;
            }
            else
            {
                C_U(c,t)=0.;
                C_V(c,t)=0.;
                C_T(c,t)=tinf;
            }
        }
    }
}
```

```
        C_YI(c,t,0)=0.;
        C_YI(c,t,1)=yoinf;
    }
}
end_c_loop_all(c,t)
}
}
/* ===== */
/*      Fi condicions inicials      */
/* ===== */
```

G ANNEX DE RESULTATS

En aquest annex es mostren alguns dels resultats de les simulacions dels casos analitzats.

G.1 Cas 1:

G.1.1 $X_{O_2} = 0,23$ i $u = 0,1$ m/s

- Contorns de temperatura (K)

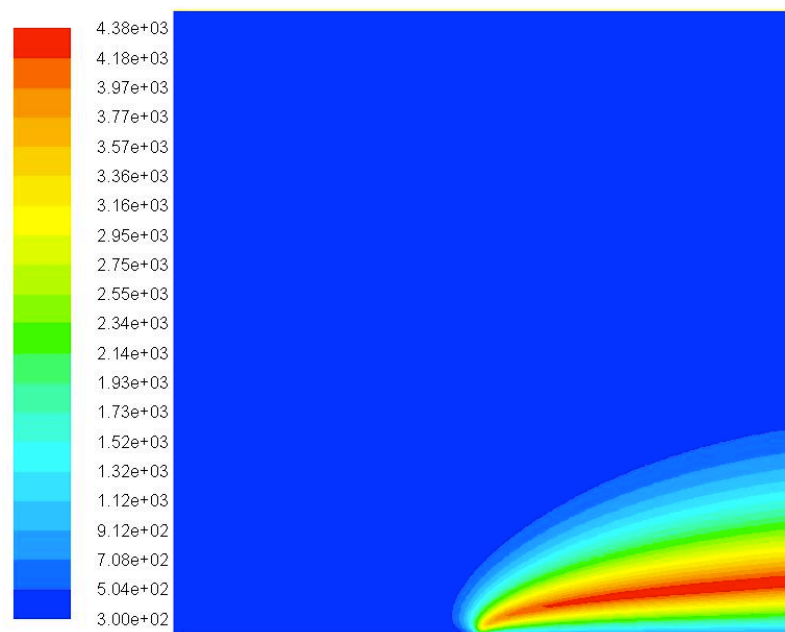


Figura 15.- Contorns de temperatura (K)

En aquest cas, la velocitat del flux a l'entrada (contorn vertical esquerra) és de 0,1 m/s. Com es pot observar a la Figura 15 la flama es troba estacionària (cas 1) i no es propaga. S'observa clarament la zona de la flama amb una temperatura màxima de 4380 K.

- Contorns de velocitats (m/s)

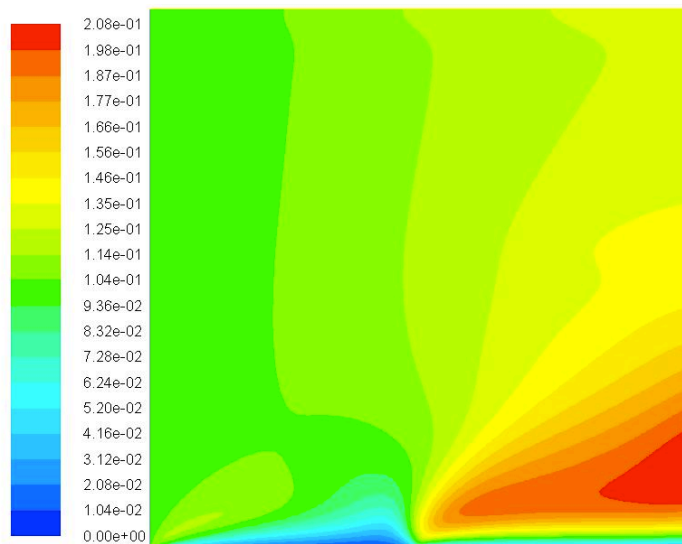


Figura 16.- Contorns de velocitats (m/s)

- Pel que fa la velocitat de l'aire es pot observar que la velocitat és màxima, amb un valor de 0,208 m/s a la zona de la flama. És màxima al lloc on la flama es propaga degut als canvis de densitat (convecció lliure).
- Concentracions en massa d'oxigen

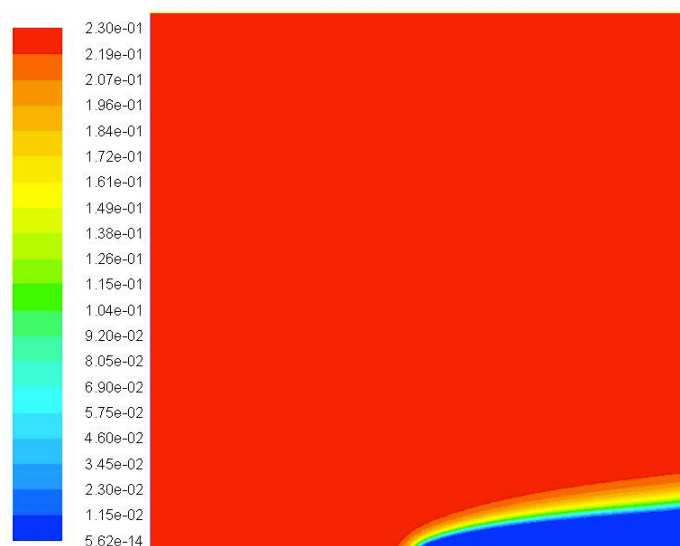


Figura 17.- Concentració en massa d'oxigen

Com és pot observar a la Figura 17 la concentració de oxigen és màxima amb un valor de 0,23 (valor que li hem donat inicialment) i es consumeix totalment en la zona on la hi ha la flama.

- Concentracions de fuel

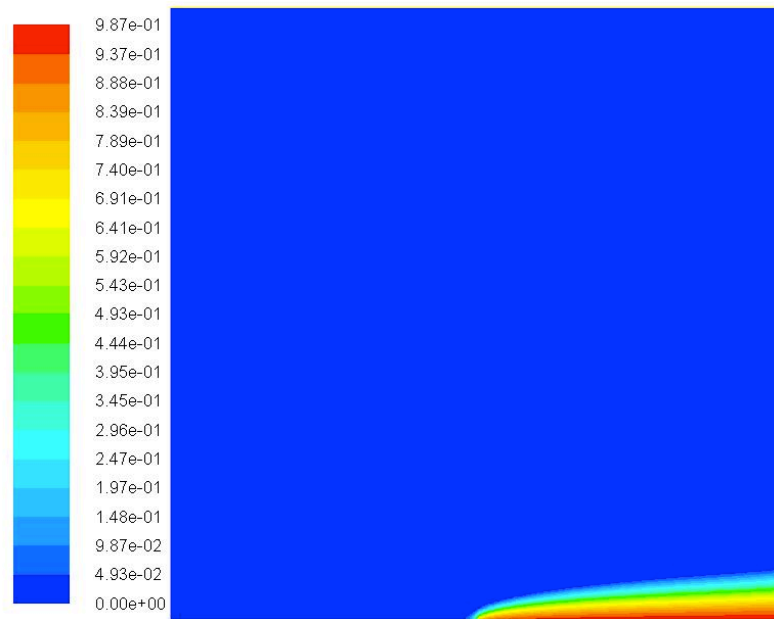


Figura 18.- Concentració de fuel

La concentració de fuel és màxima a la zona on s'ha definit l'existència del flux màssic de fuel degut a la piròlisi i és nul·la a l'altra banda de la flama. La flama, doncs, forma una frontera entre l'oxigen i la part de fuel essent clarament l'exemple d'una flama difusiva.

G.1.2 $X_{O_2} = 0,5$ i $u = 0,3$ m/s

- Contorns de temperatura (K)

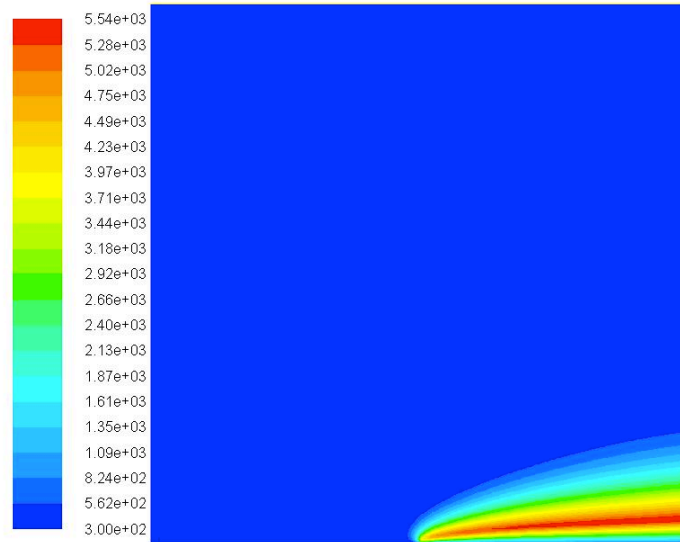


Figura 19.- Contorns de temperatura (K)

Aquest cas és té una concentració d'oxigen superior a l'anterior amb una velocitat d'entrada també més gran. Com es pot observar a la Figura 19 i comparada amb la Figura 15 és pot comprovar com la flama és molt més apaisada en aquest cas degut a l'augment en la velocitat del flux oposat. També podem observar com a l'augmentar la concentració d'oxigen, la temperatura que assoleix la flama és més elevada.

- Contorns de velocitats (m/s)

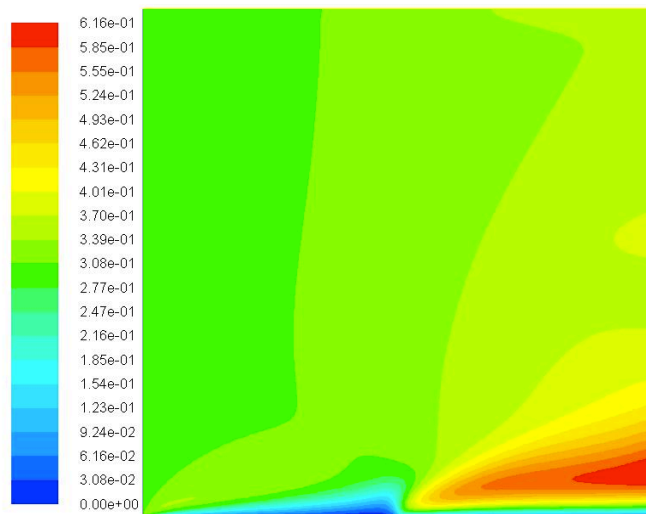


Figura 20.- Contorns de velocitats (m/s)

L'augment en la temperatura a la flama fa que, com es pot observar a la Figura 20, i comparada amb la Figura 16, la velocitat del gas és més elevada, en aquest cas arriba fins als 0,616 m/s, essent màxima on es propaga la flama.

- Concentracions en massa d'oxigen

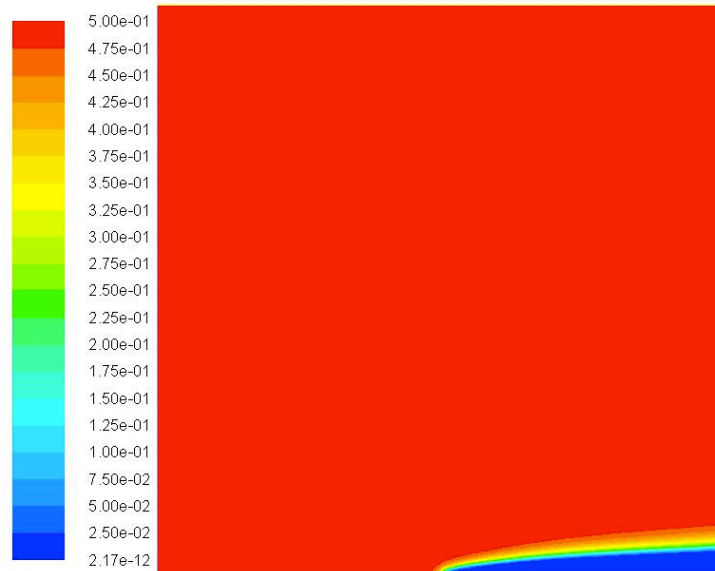


Figura 21.- Concentració de oxigen

Com és pot observar a la Figura 21 la concentració de oxigen és màxima amb un valor de 0,5 (valor que li hem donat inicialment) i té un tendint a zero (es consumeix totalment) en la zona on hi ha la flama. Comparada amb la Figura 17, la forma de la concentració és molt més apaisada, també degut a la velocitat del flux oposat.

- Concentracions de fuel

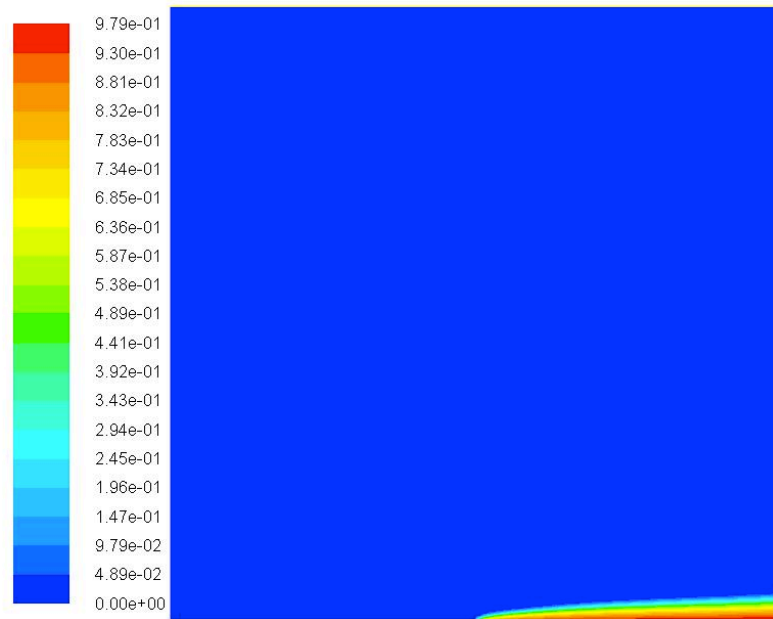


Figura 22.- Concentració de fuel

La concentració de fuel és màxima en la zona de la paret inferior on hem definit el flux màssic de fuel. S'observa la característica difusiva de la flama, on la concentració de fuel és nul·la a l'altra banda d'on hi ha la flama.

G.1.3 $X_{O_2} = 1$ i $u = 0,3$ m/s

- Contorns de temperatura (K)

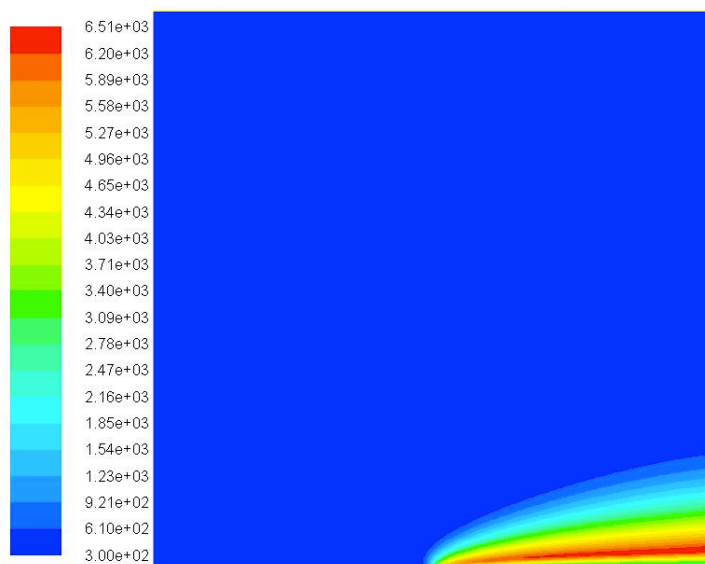


Figura 23.- Contorn de temperatura (K)

Aquest cas és molt semblant a l'anterior però amb una concentració d'oxigen inicial màxima (no hi ha gas inert). Per això, la temperatura és la més elevada en aquest cas . Arriba fins a un valor de 6510 K a la zona on hi ha la flama. Aquest és el valor que es mostrava al gràfic 1 de la memòria per a la concentració en massa d'oxigen del 100%.

- Contorns de velocitats (m/s)

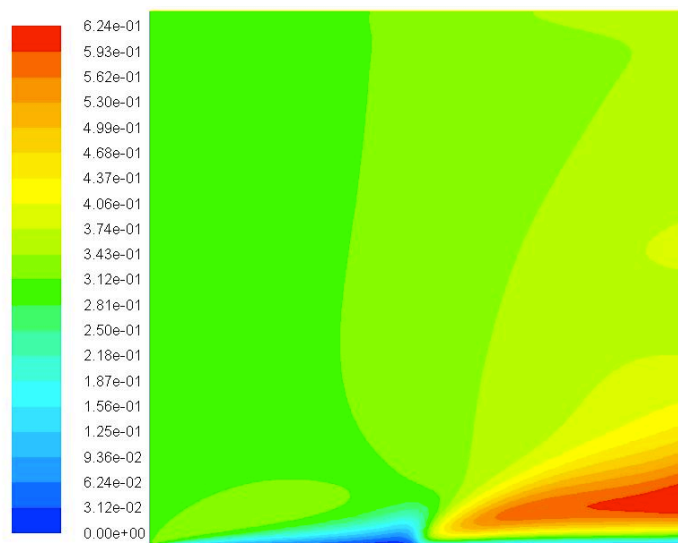


Figura 24.- Contorns de velocitats (m/s)

Les velocitats del gas també són més grans en aquest tercer cas, amb un valor de 0,624 m/s

- Concentracions en massa d'oxigen

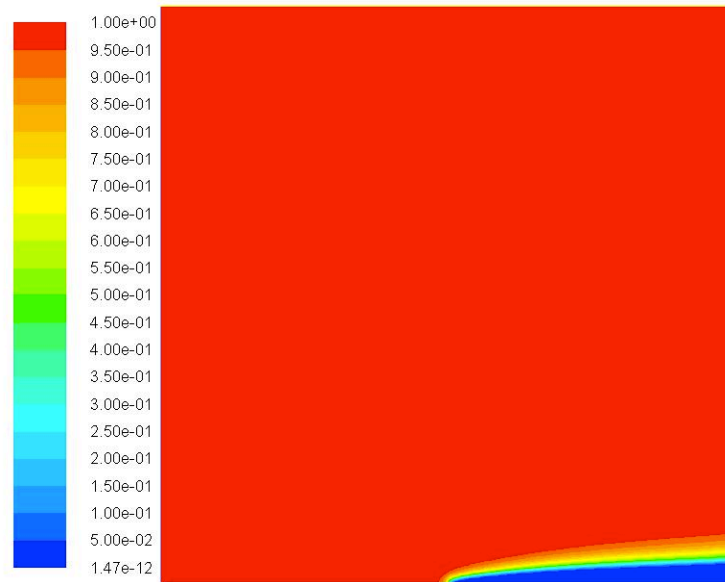


Figura 25.- Concentració en massa d'oxigen

Pel que fa a les concentracions en massa d'oxigen podem veure com en aquest cas la màxima és del 100%.

- Concentracions de fuel

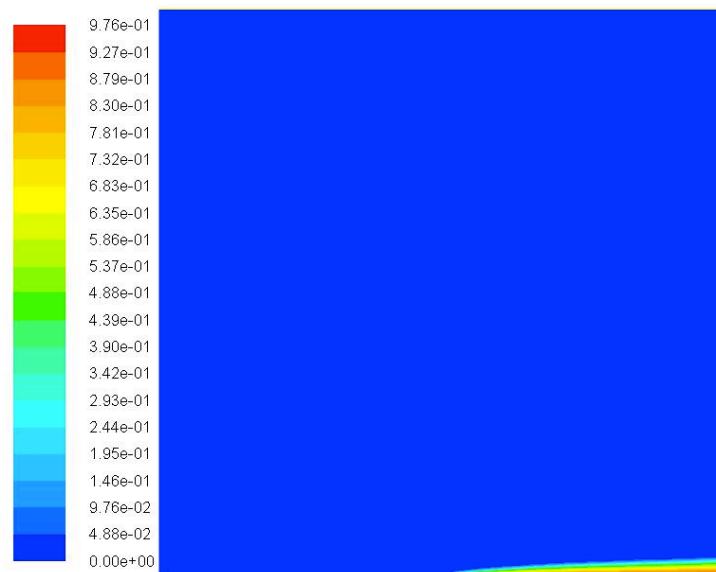


Figura 26.- Concentració de fuel

Aquest cas és molt semblant al del cas anterior on la concentració és màxima en la paret inferior i ve determinada per l'expressió del flux de massa que s'ha fixat a la superfície.

En aquest annex només s'han inclòs tres de les moltes simulacions realitzades per al cas 1.

G.2 Cas 2

G.2.1 $Y_{O_2} = 0,244$, $E_a = 120000 \text{ J mol}^{-1}$, $A = 1,58e11 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ i $t = 1 \text{ s}$

- Contorns de temperatura (K)

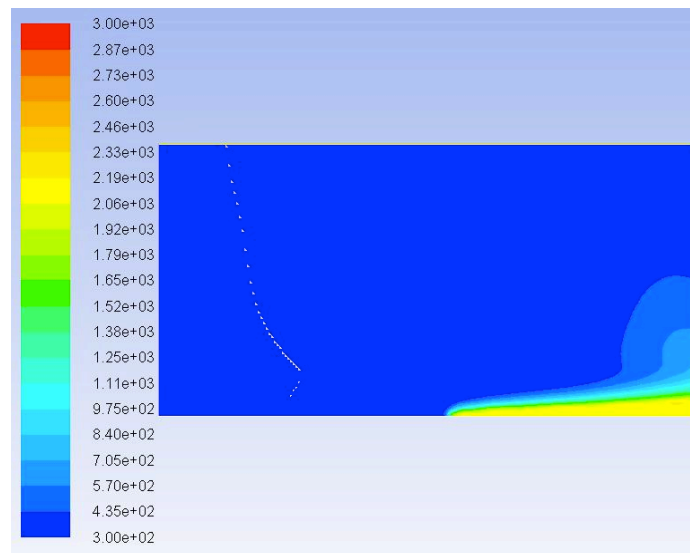


Figura 27.- Contorns de temperatura (K)

Aquest cas 2 sí que tenim una simulació transitòria. En aquest primer cas es pot observar com la flama s'ha propagat respecte a la posició inicial (que es detallava a la memòria) i assoleix una temperatura de 2000 K aproximadament a la flama.

- Contorns de velocitats (m/s)

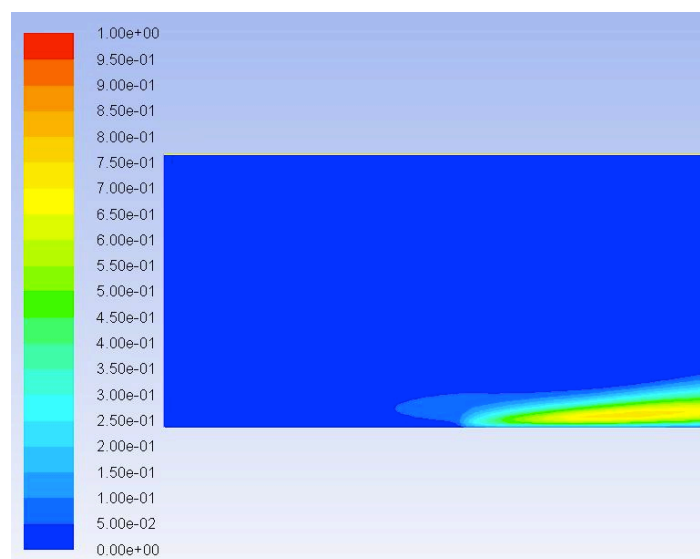


Figura 28.- Contorns de velocitats (m/s)

Com en el cas 1, i per a la velocitats dels gasos, aquesta és màxima en el punt on hi ha més canvis de densitat, assolint un valor de 0,7 m/s.

- Contorns de densitat (kg/m^3)

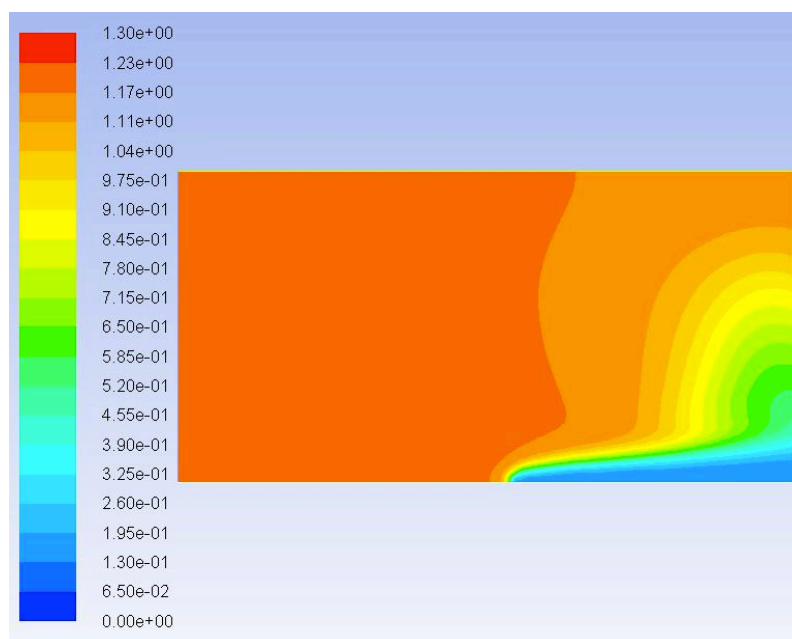


Figura 29.- Contorns de densitat (kg/m^3)

El contorn de densitats es pot observar com les densitat són més petites on la temperatura és més elevada tal i com era d'esperar ja que utilitzem la llei del gas ideal per relacionar la densitat del volum de control amb la temperatura a partir de la llei del gas ideal. Totes les simulacions utilitzen una pressió ambient d'1 bar. El valor màxim de la densitat és de $1,17 \text{ kg/m}^3$ correspon a la densitat a temperatura ambient.

- Concentracions en massa d'oxigen

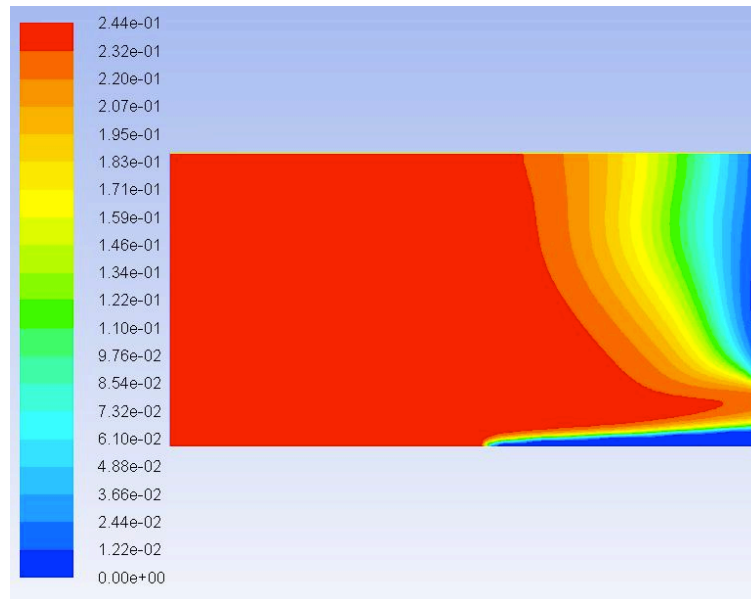


Figura 30.- Concentracions en massa d'oxigen

Es pot veure a la Figura 30 com el valor de la concentració en massa d'oxigen és del 24,4% en la regió no cremada i nul a la zona on hi ha la vaporització. El valor de concentració 0% al contorn dret és degut a la condicions de contorn que s'apliquen a la geometria i és un resultat que no correspon amb la realitat. Tot i això, aquest efecte no perjudica la simulació ja que es troba allunyat de la superfície. Potser amb una malla més gran o amb alguna altre condició, aquest efecte no es donaria.

- Concentracions en massa de fuel

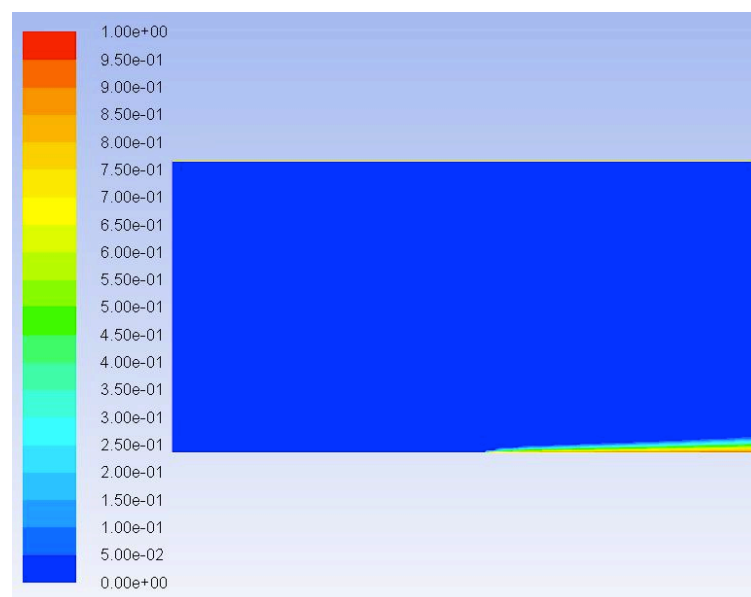
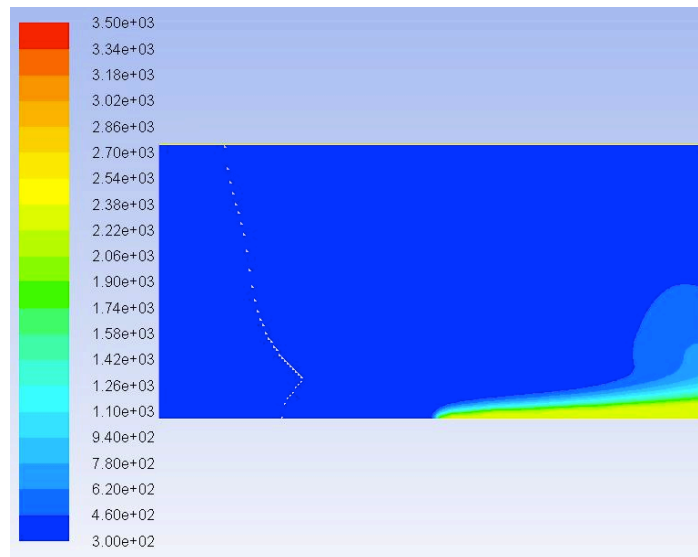


Figura 31.- Concentracions en massa de fuel

La concentració de fuel és màxima en la paret inferior de forma semblant a com s'observava en el cas 1 però a diferència d'aquell cas, aquí no especifiquem el valor de la concentració sinó que és el propi model que descriu com evoluciona el flux màssic de fuel en funció de la piròlisi a la superfície del fuel.

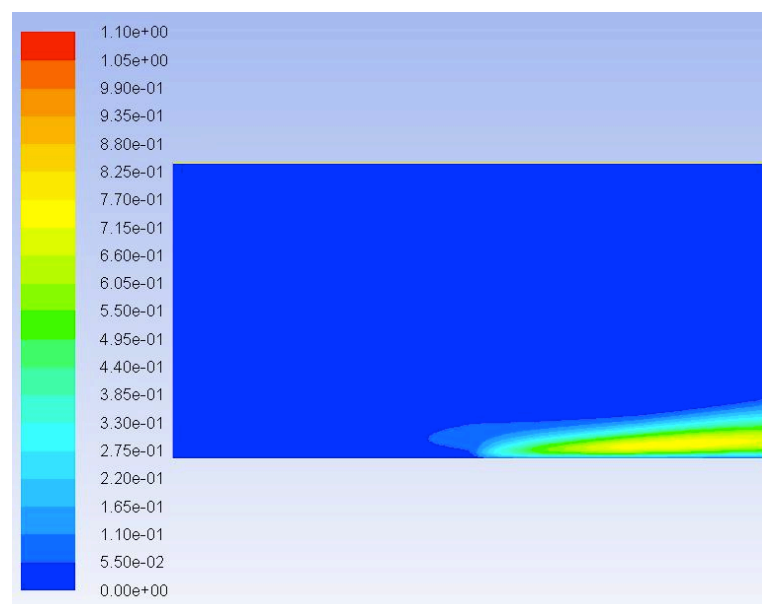
G.2.2 $Y_{O_2} = 0,275$, $E_a = 120000 \text{ J mol}^{-1}$, $A = 1,58e11 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ i $t = 1 \text{ s}$

- Contorns de temperatura (K)

**Figura 32.- Contorns de temperatura (K)**

En aquest cas és pot observar com la flama també s'ha propagat, però comparada amb la Figura 27, té una temperatura més elevada 2380 K degut a la major concentració en massa d'oxigen.

- Contorns de velocitats (m/s)

**Figura 33.- Contorns de velocitats (m/s)**

Es pot observar, comparant amb la Figura 28 que la velocitat és més elevada en aquest cas degut a que la concentració en massa d'oxigen és superior que el cas anterior (més temperatura de la flama). Les velocitats són màximes on està situada la flama degut als canvis de densitat.

- Contorns de densitat (kg/m^3)

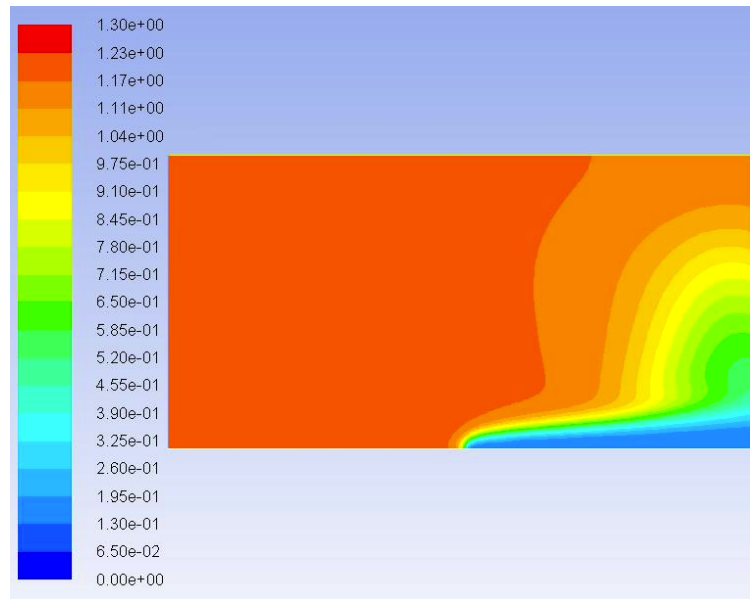


Figura 34.- Contorns de densitat (kg/m^3)

Com es pot observar la Figura 34 la densitat és més petita on la temperatura és més elevada tal i com era d'esperar.

- Concentracions en massa d'oxigen

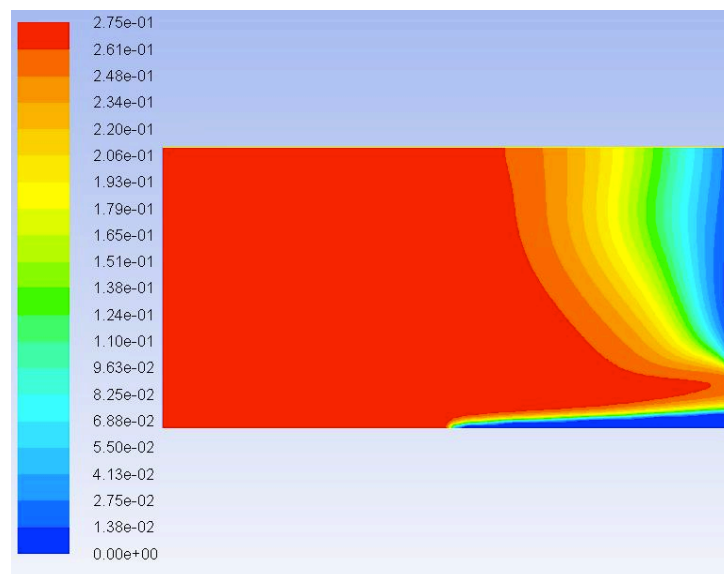


Figura 35.- Concentracions en massa d'oxigen

Es pot veure a la Figura 35 com el valor de la concentració en massa és del 27,5% en la regió on no intervé la flama. A l'igual que en el cas anterior, el valor de concentració 0% al contorn dret és degut a les condicions de contorn que s'apliquen a la geometria que possiblement podria desaparèixer si féssim un domini més gran. S'ha de tenir present que en aquesta regió no hi ha combustió i que la variació en la concentració d'oxigen no prové del terme de reacció (la temperatura és constant en aquesta zona on no hi ha conenctració de fuel, tal i com s'observa a continuació).

- Concentracions en massa de fuel

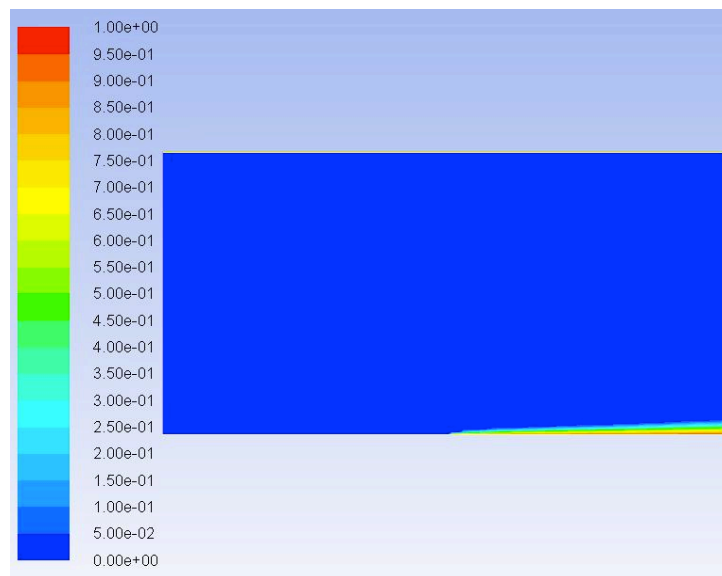
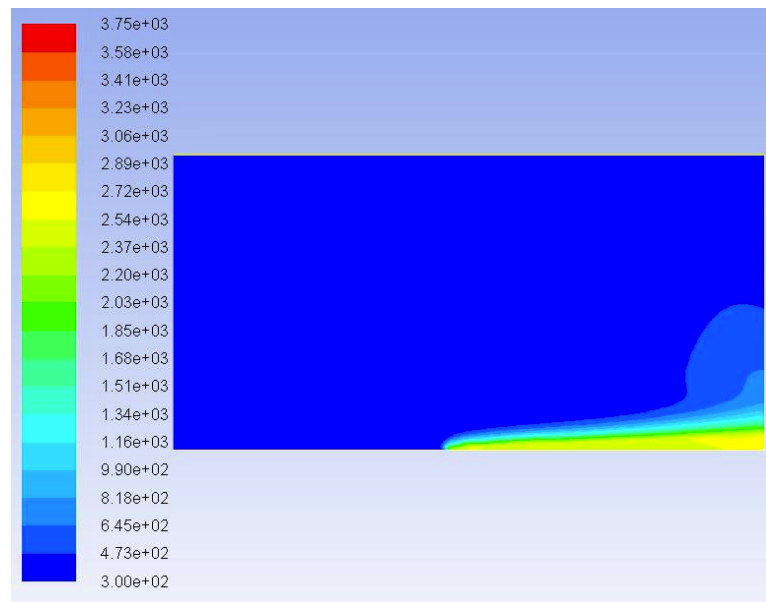


Figura 36.- Concentracions en massa de fuel

La concentració de fuel és màxima en contacte amb la paret inferior i gairebé nul·la en la resta del domini.

G.2.3 $Y_{O_2} = 0,329$, $E_a = 120000 \text{ J mol}^{-1}$, $A = 1,58e11 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ i $t = 1 \text{ s}$

- Contorns de temperatura (K)

**Figura 37.- Contorns de temperatura (K)**

En aquest cas es pot observar com la flama també s'ha propagat i una mica més lluny que en els casos anteriors ja que la concentració d'oxigen és més elevada. Comparada amb la Figura 32, ara s'assoleix una temperatura més elevada 2540 K degut a la major concentració en massa d'oxigen.

- Contorns de velocitats

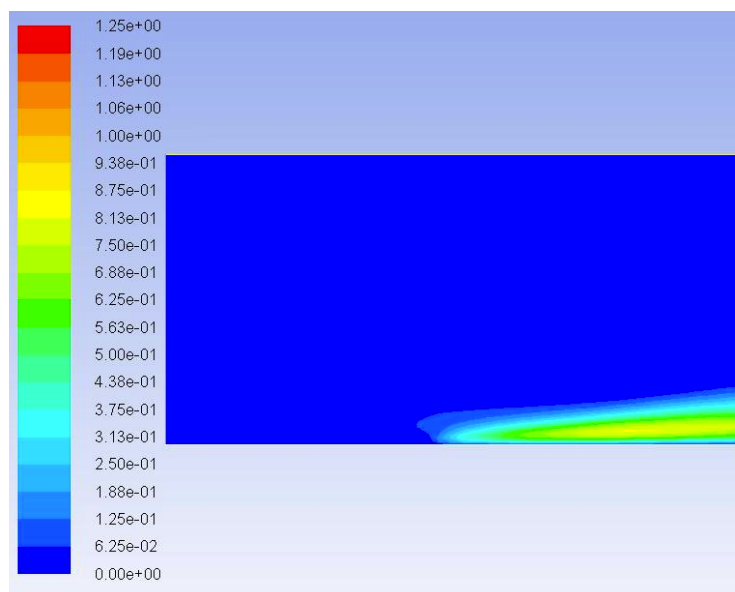


Figura 38.- Contorns de velocitats (m/s)

Es pot observar, comparant amb la Figura 33 que la velocitat és més elevada en aquest cas degut a que la concentració en massa d'oxigen. Les velocitats són màximes on està situada la flama degut als canvis de densitat tal i com succeïa en els casos anteriors.

- Contorns de densitat (kg/m^3)

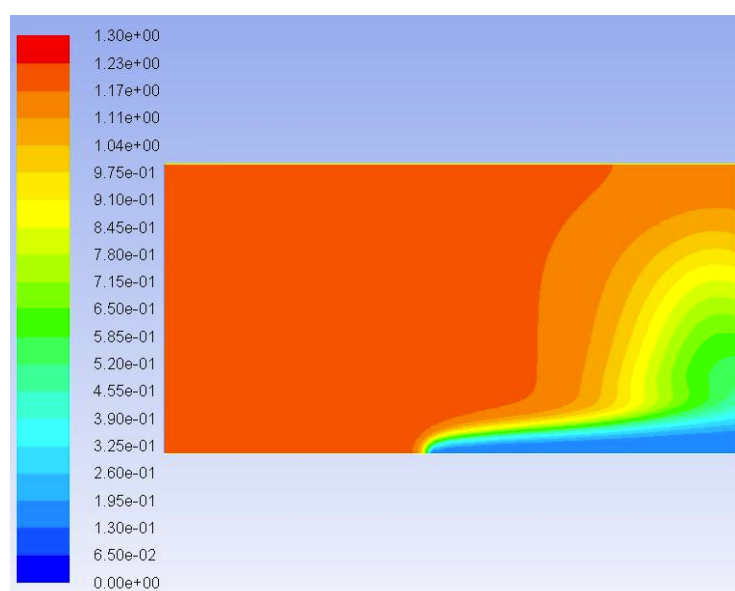


Figura 39.- Contorns de densitat (kg / m^3)

A la Figura 39 s'observa un comportament molt similar al dels casos anteriors on la densitat és molt petita on la temperatura és més alta.

- Concentracions en massa d'oxigen

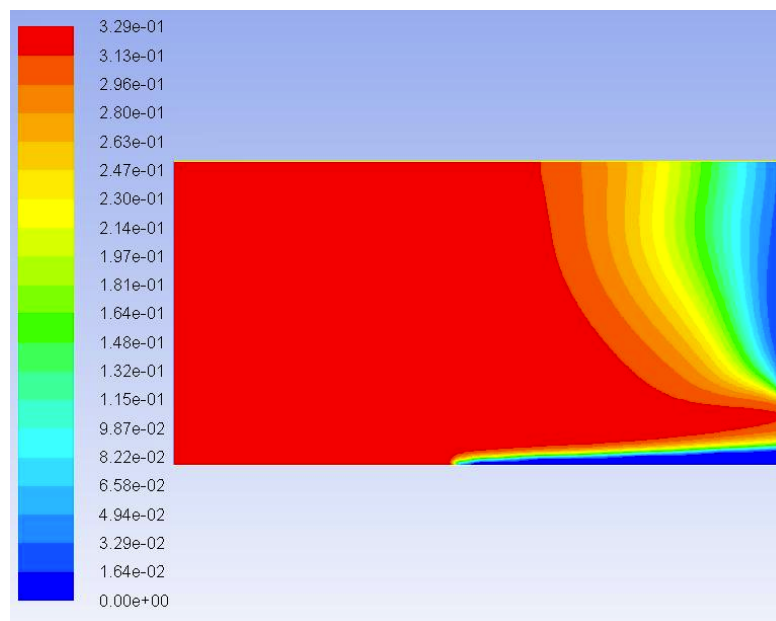


Figura 40.- Concentracions en massa d'oxigen

Es pot veure a la Figura 40 com el valor de la concentració és del 32,9% en la major part del domini i correspon al valor inicial. Les possibles causes del valor de concentració 0% al contorn dret ja s'han comentat en casos anteriors.

- Concentracions en massa de fuel

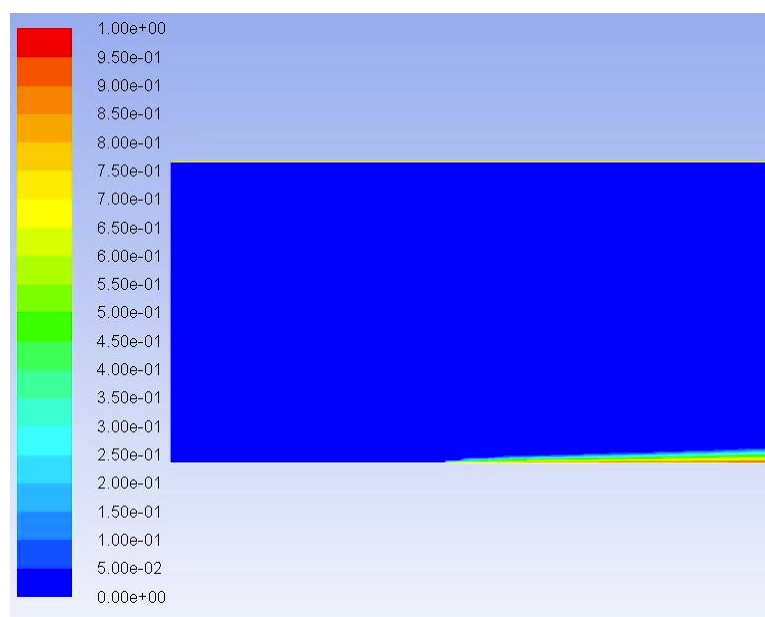


Figura 41.- Concentracions en massa de fuel

Tal i com era d'esperar, la concentració de fuel és màxima en la paret inferior.

G.2.4 $Y_{O_2} = 0,533$, $E_a = 120000 \text{ J mol}^{-1}$, $A = 1,58e11 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ i $t = 1 \text{ s}$

- Contorns de temperatura (K)

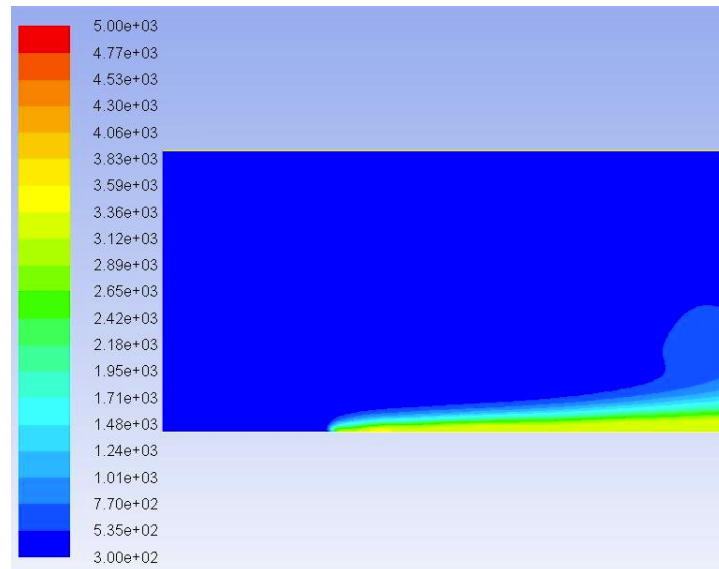


Figura 42.- Contorns de temperatura (K)

En aquest cas és pot observar com la flama, també s'ha propagat, però comparada amb la Figura 37, té una temperatura més elevada 3380 K degut a la major concentració en massa d'oxigen.

- Contorns de velocitats (m/s)

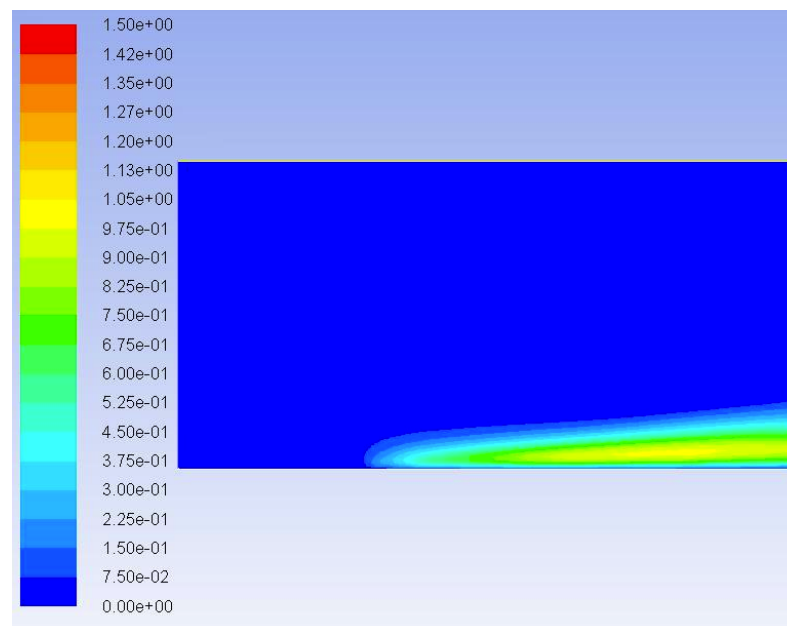


Figura 43.- Contorns de velocitats (m/s)

Es pot observar, comparant amb la Figura 38 que la velocitat és més elevada en aquest cas degut a que la concentració en massa d'oxigen. Les velocitats són màximes on està situada la flama degut als canvis de densitat.

- Contorns de densitat (kg/m^3)

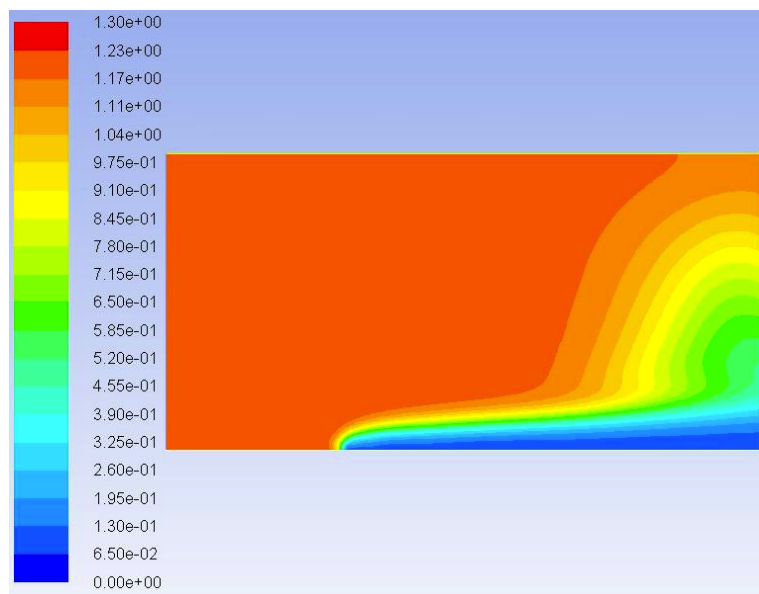


Figura 44.- Contorns de densitat (kg/m^3)

Es pot observar que les zones de densitat són molt baixes a la zona on la temperatura és més elevada tal i com era d'esperar.

- Concentracions en massa d'oxigen

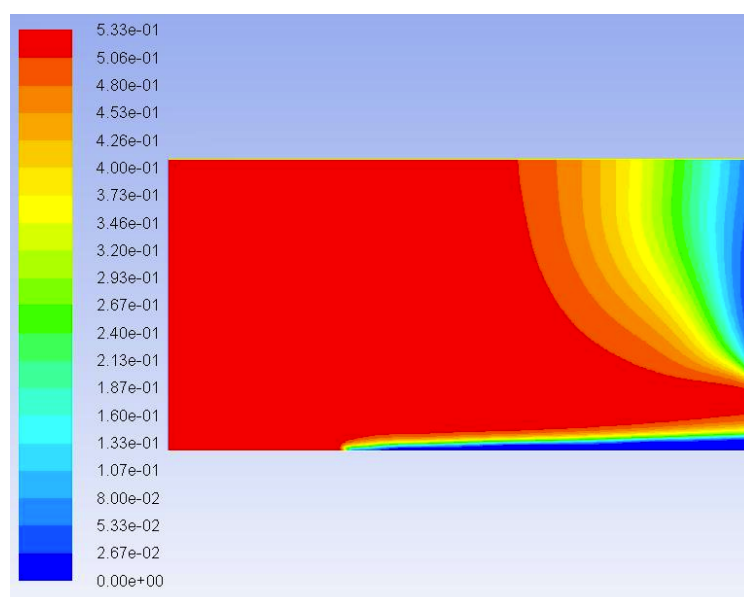


Figura 45.- Concentracions en massa d'oxigen

Es pot veure a la Figura 45 com el valor de la concentració és del 53,3% en la major part del domini ja que aquesta és la concentració inicial d'oxigen. El valor de concentració 0% al contorn dret és degut a la condicions de contorn que s'apliquen a la geometria.

- Concentracions en massa de fuel

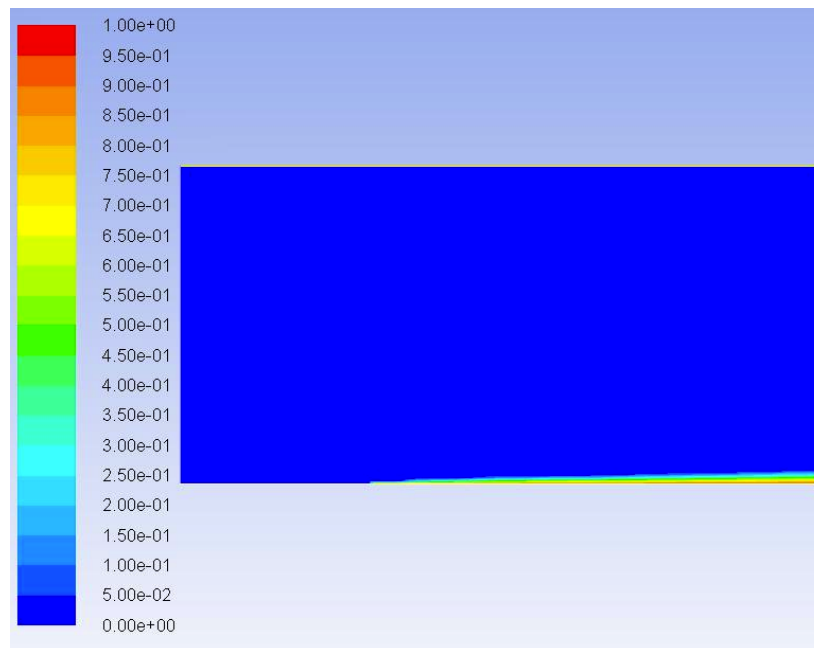
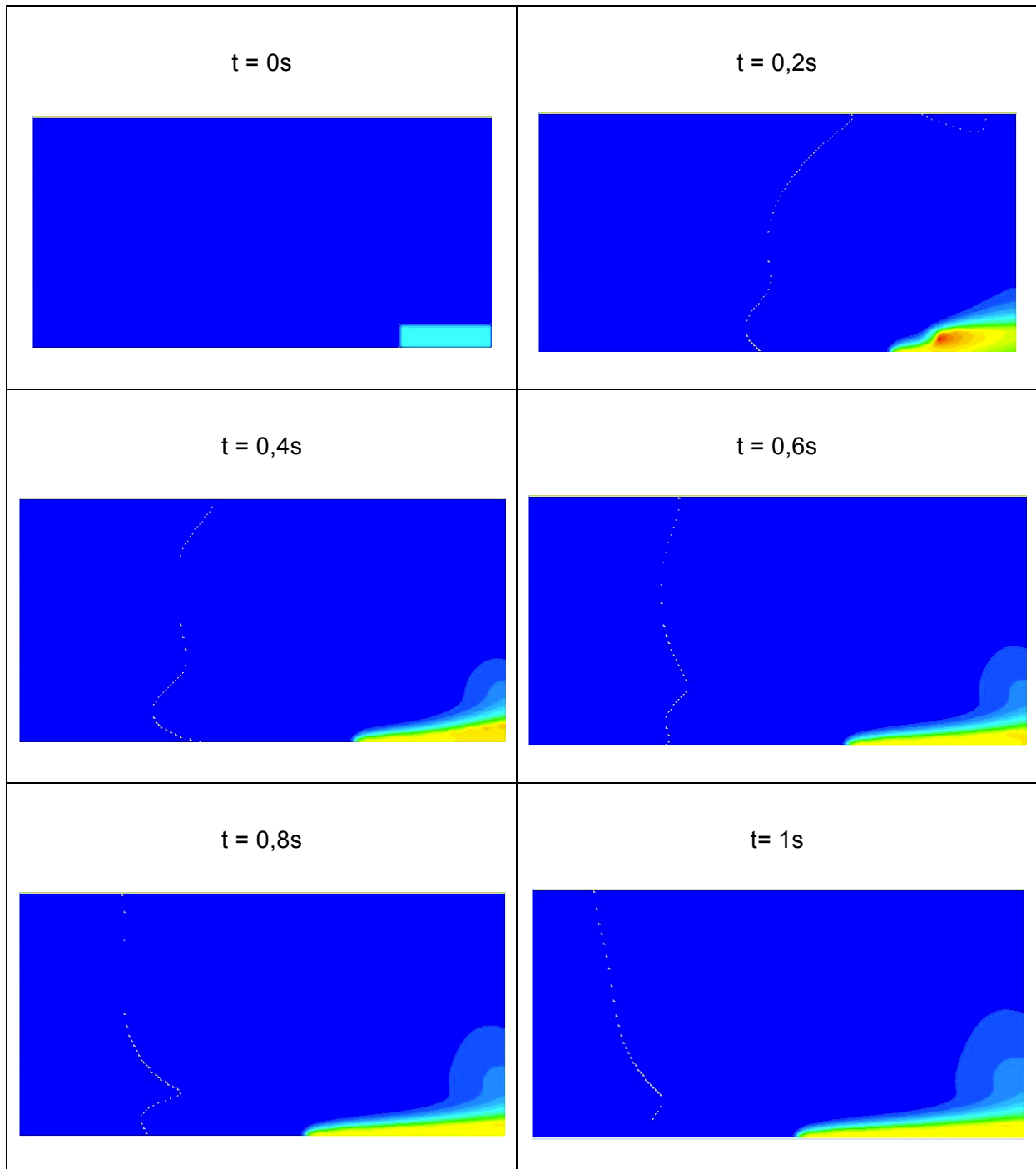


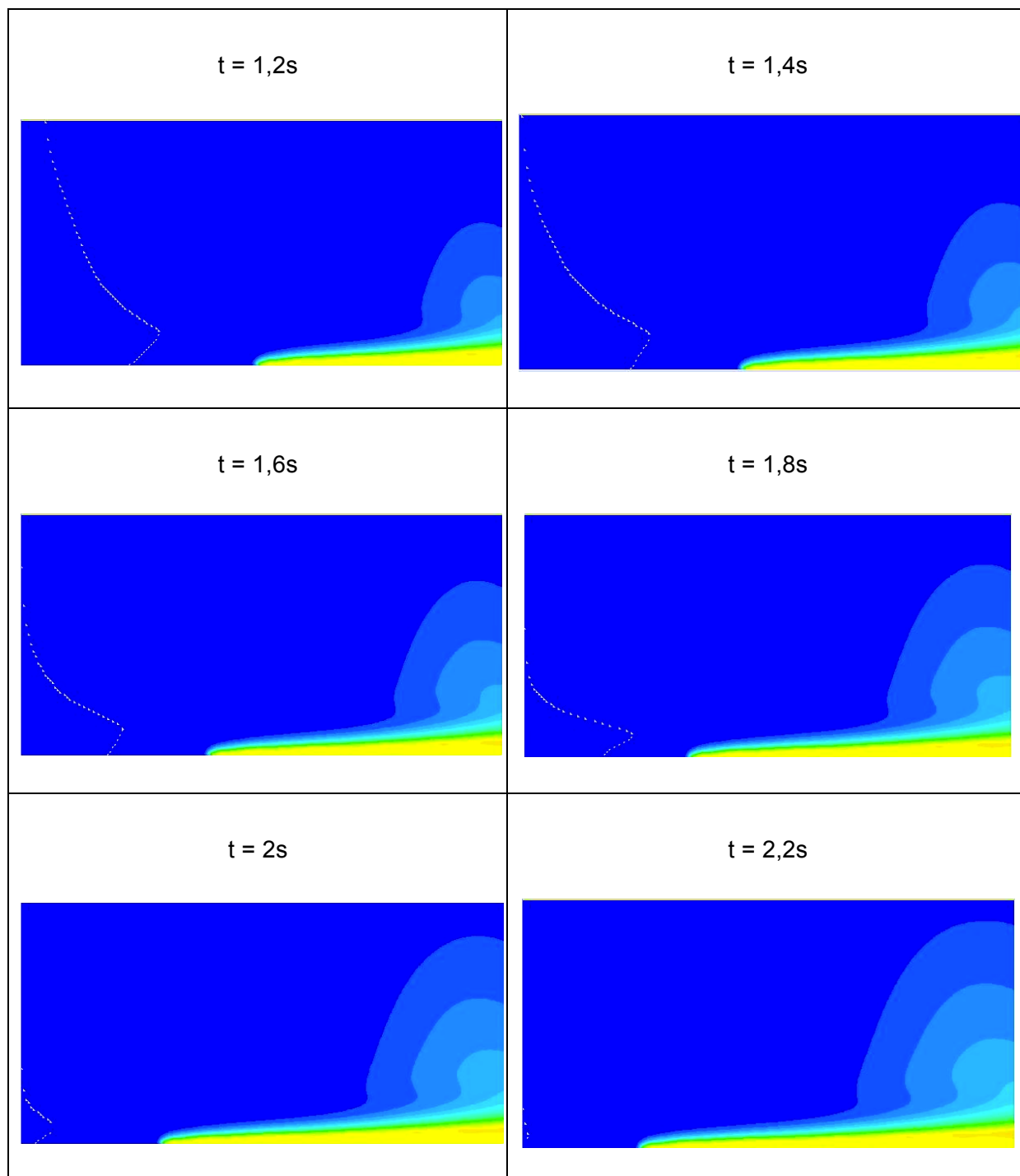
Figura 46.- Concentracions en massa de fuel

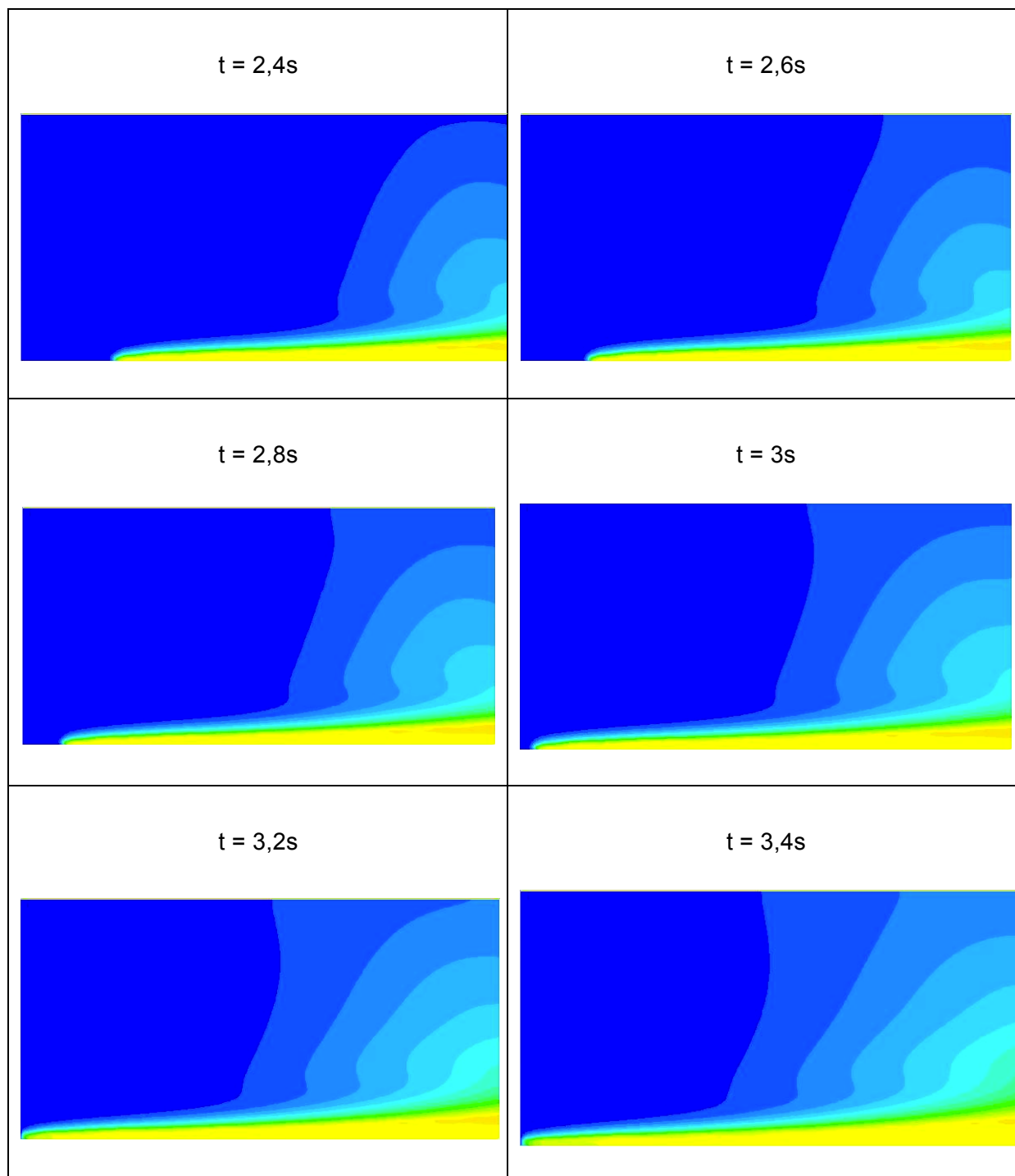
Com s'ha comprovat en els anteriors casos, la concentració de fuel és màxima en la paret inferior.

G.2.5 Evolució de la flama amb $Y_{O_2} = 0,244$, $E_a = 120000 \text{ J mol}^{-1}$, $A = 1,58e11 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ en funció del temps

A la Taula 1 es pot veure com evoluciona la temperatura en funció del temps. S'observa com la flama avança fins a arribar al final del domini en un temps de 3,2s.







Taula 1.- Evolució de la flama en funció del temps

H PRESSUPOST

Maquinària			
	Preu	Amortització	Total
Ordinador	700 €	5%	35,00 €
Software	1000 €	5%	50,00 €
		Subtotal 1	85,00 €

Mà d'Obra			
	Preu/h	Hora	Total
Hores de Redactor	6 €/h	15 h	90,00 €
Hores d'Enginyer	20 €/h	60 h	1200,00 €
Hores d'Enginyer Especial	35 €/h	65 h	2275,00 €
		Subtotal 2	3565,00 €

Σ Subtotal	3650,00 €
IVA (21%)	766,5 €
TOTAL	4416,5 €

Taula 2.- Factura

