



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID
ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES**

Grado en Ingeniería Mecánica

**Estudio de la influencia de las propiedades
termodinámicas de los inertes en el proceso de
combustión premezclada**

**Autor:
Durán Muñoz, Miguel**

**Tutor:
Dr. Andrés Melgar Bachiller**

**Departamento de Ingeniería
Energética y Fluidomecánica**

Valladolid, junio 2018

RESUMEN

Mediante la utilización de una instalación, provista de una bomba de combustión a volumen constante, preparada para la realización de combustiones premezcladas definidas por el usuario mediante una hoja de Excel, se obtiene un registro temporal de la presión en el interior de esta durante el proceso de ignición de la mezcla. Este registro es volcado desde un osciloscopio a un ordenador mediante LabVIEW y tratado con un modelo de diagnóstico programado en C. Con el modelo de diagnóstico se obtienen representaciones de la velocidad de combustión laminar del frente de llama en función de diferentes variables termodinámicas para cada ensayo. Las representaciones son analizadas y se consiguen las conclusiones oportunas en relación con las propiedades termodinámicas de los gases inertes presentes en cada experimento.

PALABRAS CLAVE

Bomba de Combustión a Volumen Constante, velocidad de combustión laminar, frente de llama, combustión premezclada, ensayos.

ABSTRACT

By means of the utilization of an installation, provided with a bomb of combustion to constant volume, prepared for the test combustions mixed previously and defined by the user by means of a leaf of Excel, a temporary record of the pressure is obtained inside this one during the process of ignition of the mixture. This record is overturned from an oscilloscope to a computer by means of LabVIEW and process by a model of diagnosis programmed in C. With the model of diagnosis is obtained representations of the speed of combustion laminate of the front of flame depending on different thermodynamic variables for every test. The representations are analyzed and the opportune conclusions are obtained in relation by the thermodynamic properties of the inert present gases in every experiment.

KEY WORDS

Constant Volumen combustion Chamber, laminar burning velocity, flame front, premixed combustion, tests.

AGRADECIMIENTOS

Todo empezó como un reto personal, como un camino lleno de piedras y baches en el que la meta está en lo alto de una gran colina. Siempre soñaba con llegar a este punto, desde el momento en el que aprobé mi primera asignatura hasta que superé la última en el fondo sabía que lo conseguiría. Aún no puedo decir que lo haya conseguido, pero ya sólo me queda el último empujón, la última gota de combustible para llegar a ese objetivo soñado. Quien me iba a decir a mí hace unos años que pudiese estar tan agradecido a los profesores de esta facultad, que, con sus exigencias, que podré catalogar cómo los baches del camino han hecho que como yo y mis compañeros de facultad salgamos infinitamente preparados para poder esquivar los socavones del futuro.

Eternamente agradecido a mi tutor de TFG, Andrés, por conseguir darme la chispa para conquistar la cima de la colina.

Infinitamente agradecido a mis amigos de facultad, “Javi”, “Campa”, “Dava”, Víctor, los cuales han hecho más fácil el camino hacia la cumbre. Lo mismo digo con mis prácticamente compañeros de piso, “Manolillo”, “Juanjo”, “Chispa”, sin ellos los ratos agradables no hubiesen existido y el camino hubiese estado más oscuro.

Finalmente, Gracias, a mis padres, Miguel y Belén, y a mi querida Elena, por los consejos proporcionados, por aguantarme, por acompañarme y por ayudarme a conseguir que lo que todo empezó como un sueño, se haya convertido en una realidad muy cercana.

ÍNDICE

ÍNDICE.....	9
1. LISTA DE FIGURAS Y REPRESENTACIONES.....	11
2. SIGLAS Y SÍMBOLOS.....	14
2.1. Siglas.....	14
2.2. Símbolos.....	14
3. INTRODUCCIÓN.....	17
3.1. Antecedentes.....	17
3.2. Justificación.....	18
3.3. Objetivos.....	19
3.4. Desarrollo y estructura del trabajo.....	21
4. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL.....	25
4.1. Bomba de combustión a volumen constante (BCVC).....	27
4.2. Sistema de abastecimiento de gases.....	30
4.3. Sistema de ignición.....	32
4.4. Sistema de producción de calor.....	34
4.5. Instrumentación.....	35
4.5.1. Captadores de presión.....	35
4.5.2. Amplificador y registro de presión.....	37
4.6. Metodología de los ensayos.....	39
5. MÉTODO DE CÁLCULO.....	42
5.1. Estructura del problema y definición de conceptos.....	42
5.1.1. Variables de entrada.....	43
5.1.2. Datos invariables y constantes del NIST.....	45
5.1.3. Fracciones molares y entalpías.....	47
5.1.4. Presiones parciales de llenado.....	47
5.2. Síntesis de cálculo.....	47
5.2.1. Cálculo de coeficientes estequiométricos en la reacción.....	49
5.2.2. Cálculo de entalpías.....	55
5.2.3. Masa molecular de cada compuesto.....	55
5.2.4. Entalpía específica de la mezcla.....	55
5.2.5. Fracciones molares.....	56
5.2.6. Presiones parciales en la BCVC.....	57
5.3. Estructura de cálculo en la hoja de Excel.....	58
5.3.1. Variables de entrada.....	58

5.3.2.	Datos invariables y constantes NIST.....	59
5.3.3.	Cálculo.....	60
5.3.4.	Fracciones molares.....	60
5.3.5.	Presiones para la etapa de llenado	61
6.	PLAN DE ENSAYOS, RESULTADOS Y ANÁLISIS	63
6.1.	Plan de ensayos.....	64
6.2.	Resultados y análisis.....	65
6.2.1.	Comparación de combustibles	69
6.2.2.	Comparación de series	75
7.	CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS	79
7.1.	Conclusiones.....	79
7.2.	Trabajos futuros	80
8.	ANEXOS	82
8.1.	Macro para aplicar el método de la bisección	82
8.2.	Macro para aplicar el método de las presiones parciales.....	83
9.	REFERENCIAS.....	87

1. LISTA DE FIGURAS Y REPRESENTACIONES

Figura 1: Representación gráfica de valores de la presión frente al tiempo para dilución $D=1.5$, con variación en la proporción de EGR en la mezcla (izquierda) y representación gráfica de valores de la velocidad de combustión frente a la temperatura de los gases no quemados para dilución $D=1.4$, con variación en la proporción de EGR en la mezcla (derecha) [Neher, 2017, p. 91].....	19
Figura 2: Pirámide invertida de objetivos.....	20
Figura 3: Representación del frente de llama dentro de la bomba [Adaptado de Lafuente, 2008, p. 129].....	21
Figura 4: Esquema de la estructura del TFG	22
Figura 5: Fotografía de la instalación del laboratorio.....	25
Figura 6: Esquema de la instalación del laboratorio [Adaptado de Neher, 2017, p. 54]	26
Figura 7: Corte transversal del perfil de la BCVC [Reyes, 2008, p.87]	28
Figura 8: Modelo 3D de la BCVC [Reyes, 2008, p.89]	28
Figura 9: Aspecto exterior de la BCVC sin aislante (izquierda) y con aislante (derecha)	28
Figura 10: Panel de control de la instalación.....	30
Figura 11: Esquema del panel de control [Adaptado de Lafuente, 2008, p. 99]	31
Figura 12: Esquema del sistema de extracción (izquierda) y fotografía del sistema de almacenamiento de los gases (derecha) [Lafuente, 2008, p. 101].....	32
Figura 13: Partes de la instalación del sistema de encendido.....	33
Figura 14: Posición de electrodos dentro de la BCVC.....	34
Figura 15: Controlador PID modelo. Valor inferior: Temperatura de consigna. Valor superior: Variable de entrada recibida del termopar. Modelo: Toho TTM-104.....	34
Figura 16: Aspecto de los transductores piezorresistivos (Derecha) en la instalación y su display (izquierda) para lectura	36
Figura 17: Efecto de una carga F sobre las cargas de un material piezoeléctrico	36
Figura 18: Transductor utilizado: Kistler 7063	37
Figura 19: Aspecto del amplificador de la instalación. Modelo: Kistler 5015.....	37
Figura 20: Osciloscopio y módulo de disparo (trigger).....	38
Figura 21: Esquema de la instrumentación de la instalación [Adaptado de Lafuente, 2008, p.106].....	38
Figura 22: Ejemplo del registro de la presión frente al tiempo en un ensayo	40

Figura 23: Estructura del problema de cálculo.....	43
Figura 24: Premisas del problema de cálculo.....	43
Figura 25: Representación gráfica de T_{nq} y de T_q en función del tiempo para una mezcla y condiciones determinadas [Iglesias, 2015, pág. 164].....	45
Figura 26: Constantes del problema.....	46
Figura 27: Coeficientes NIST.....	46
Figura 28: Vista general de la hoja de cálculo para un ejemplo.....	58
Figura 29: Celdas de introducción de valores de las premisas en la hoja de Excel.....	59
Figura 30: Celdas para la introducción de valores de proporción en la hoja de Excel...	59
Figura 31: Constantes NIST.....	59
Figura 32: Porcentaje invariable de O_2 en el aire.....	60
Figura 33: Espacio de cálculo.....	60
Figura 34: Tablas de composición.....	61
Figura 35: Celdas de información de la composición y de la presión de llenado del gas i.....	61
Representación 1: Presión en función del tiempo (Ensayo 2).....	66
Figura 36: Evolución temporal modelo de la presión durante una deflagración laminar en una BCVC con condiciones iniciales: $P_{llenado}=5\text{bar}$ y $T_{sq}=360\text{K}$. [Iglesias, 2015, p. 109].....	67
Representación 2: Temperatura de productos quemados en función de la temperatura de gases no quemados (Ensayo 2).....	67
Representación 3: FQL en función del radio del frente de llama (Ensayo 2).....	68
Representación 4: Velocidad de combustión laminar en función de la temperatura de los gases no quemados (Ensayo 2).....	69
Representación 5: Presión en función del tiempo (Ensayos 1,4 y 7).....	70
Representación 6: T_q en función de T_{sq} (Ensayos 1,4 y 7).....	70
Representación 7: C_t en función de T_{sq} (Ensayos 1,4 y 7).....	70
Representación 8: Presión en función del tiempo (Ensayos 2,5 y 8).....	72
Representación 9: T_q en función de T_{sq} (Ensayos 2,5 y 8).....	72
Representación 10: C_t en función de T_{sq} (Ensayos 2,5 y 8).....	72
Representación 11: Presión en función del tiempo (Ensayos 3 y 9).....	73
Representación 12: T_q en función de T_{sq} (Ensayos 3 y 9).....	74
Representación 13: C_t en función de T_{sq} (Ensayos 3 y 9).....	74

Representación 14: Registro temporal de la presión de todos los ensayos 75
Representación 15: Representación de T_q en función de T_{sq} en todos los ensayos..... 76
Representación 16: Representación de C_t en función de T_{sq} para todos los ensayos 77

2. SIGLAS Y SÍMBOLOS

2.1. Siglas

EII- Escuela de Ingenierías Industriales

Uva- Universidad de Valladolid

IEF- Ingeniería Energética y Fluidomecánica

PC- Personal Computer

MCIA- Motor de Combustión Interna Alternativo

MEP- Motor de Encendido Provocado

EGR- Exhaust Gas Recirculation

MATLAB- MATrix LABoratory

BCVC- Bomba de Combustión a Volumen Constante

CA- Corriente Alterna

CC- Corriente Continua

PID- Proporcional Integral Derivativo

FQL- Fracción de calor liberado

2.2. Símbolos¹

C_t- Velocidad de combustión laminar

T_q- Temperatura de gases quemados o temperatura de productos quemados

T_{sq}- Temperatura de gases sin quemar o temperatura de reactivos sin quemar

T_{nq}- Temperatura de gases no quemados o temperatura de reactivos sin quemar

¹ Algunos símbolos pueden tener localmente diferentes subíndices

P- Presión

h- Entalpía

n_i- Moles de compuesto i

n'_i- Moles de compuesto i después de equilibrio

x_i- Fracción molar de compuesto i

X_i- Proporción de inertes en la mezcla

K_p- Constante de equilibrio

K_i- Átomos de compuesto i

P_{m_i}- Peso atómico de elemento i

m_i- Masa molecular de compuesto i

R_f- Radio del frente de llama

Capítulo 3: **INTRODUCCIÓN**

3. INTRODUCCIÓN

La creciente importancia de reducir los gases de efecto invernadero, junto con la obligatoriedad de cumplir las leyes cada vez más restrictivas en materia de medio ambiente, hacen que se ponga en el punto de mira el proceso por el cuál estos gases se producen: la combustión.

El análisis de este proceso termoquímico será objeto de estudio durante todo este trabajo, donde a través de la instalación ubicada en el laboratorio de máquinas y motores térmicos de la EII (Escuela de Ingenieros Industriales) de Valladolid, se puede medir la velocidad de combustión laminar de los combustibles disponibles, en función de un conjunto de variables que se verán más adelante.

A modo de introducción y para situar este estudio, el término combustión tendrá sentido cuando se refiera al proceso por el cual un combustible y un oxidante reaccionen exotérmicamente en la cámara de combustión de un motor MEP (Motor de Encendido Provocado) en el cuál, la energía cinética desprendida en el desarrollo de este fenómeno, se aprovecha para desplazar el pistón y por consiguiente hacer que este funcione.

3.1. Antecedentes

El presente trabajo fin de grado aporta un poco más de experiencia al Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica (IEF) de la Uva (Universidad de Valladolid), el cual analiza el uso de combustibles alternativos a los convencionales en motores térmicos y, a su vez, estudia la modificación y regulación de dichos motores para la adaptación a estos combustibles.

Gracias a la instalación situada en el laboratorio de dicho departamento, han sido posibles todos los ensayos de este y otros tantos trabajos. Además, han hecho posible que la experiencia alcanzada en los anteriores vaya siendo completada con los actuales, siempre dando sentido al objetivo: buscar combustibles alternativos más eficientes, optimizando su uso y por lo tanto menos contaminantes o incluso inocuos para el medio ambiente.

En particular, este TFG no tendría sentido sin el trabajo previo del Dr. Denis Neher (2017), en forma de Tesis, en la cual investiga y experimenta con EGR (en inglés, Exhaust

Gas Recirculation) en combustibles gaseosos, siendo EGR la recirculación de los gases producidos de combustiones anteriores para aprovecharlos en las sucesivas. En ese trabajo, Neher se ocupa de analizar cómo sería implementar este sistema en un pequeño motor convencional de cogeneración, con el fin de mejorar la eficiencia, la potencia y de reducir las emisiones de NO_x . Para ello, entre otros objetivos, estudia cómo influye la variabilidad de las mezclas gaseosas de combustible- inerte, en la combustión, bajo ciertas condiciones físico-químicas, mediante su ignición en una bomba a volumen constante.

Otro de los autores que sirven de referencia para este TFG es el Dr. Álvaro Lafuente (2008), en cuya investigación desarrolla una metodología experimental que permite obtener valores de la velocidad de combustión en mezclas de gases combustibles en función de su composición, presión, temperatura de mezcla fresca y dosado en condiciones termodinámicas propias de un MEP.

Con los conceptos y experiencias adquiridas con estos dos autores y otras investigaciones consultadas (Reyes, 2008 e Iglesias, 2015) que han seguido esta misma línea de investigación, han servido para asentar los conocimientos necesarios para poder continuar con los ensayos de nuevas mezclas combustibles.

3.2. Justificación

En el presente TFG se realiza un estudio experimental, ampliación de los trabajos ya citados en el apartado anterior y en particular de uno de ellos.

Neher (2017) en el capítulo 7 de su tesis, analiza la velocidad de combustión de una mezcla, variando el dosado y añadiendo EGR. Para esto utiliza la bomba a volumen constante del departamento y la metodología de ensayo experimental que explica también en uno de sus capítulos. Durante la combustión, a través del registro de presión del interior de la bomba (Ver figura 1, izquierda) y mediante el modelo de diagnóstico implementado en MATLAB (MATrix LABoratory), obtiene las curvas representativas de la mezcla en función de la velocidad de combustión y la temperatura de los gases no quemados (Ver figura 1, derecha)

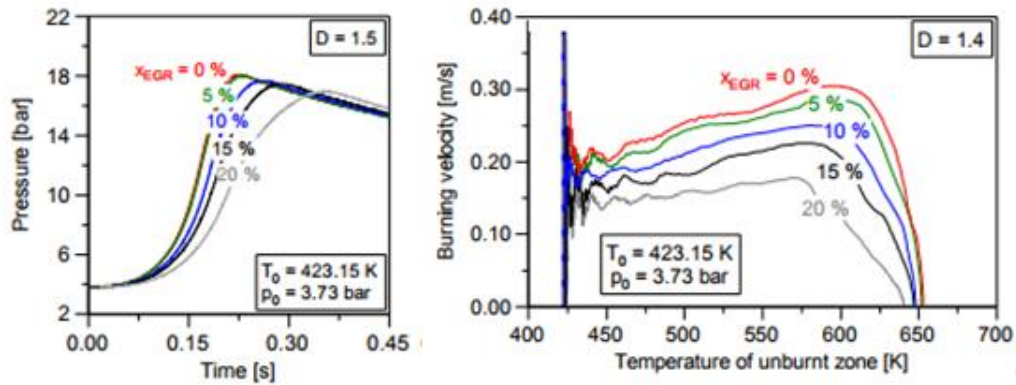


Figura 1: Representación gráfica de valores de la presión frente al tiempo para dilución $D=1.5$, con variación en la proporción de EGR en la mezcla (izquierda) y representación gráfica de valores de la velocidad de combustión frente a la temperatura de los gases no quemados para dilución $D=1.4$, con variación en la proporción de EGR en la mezcla (derecha) [Neher, 2017, p. 91]

En este trabajo se lleva un proceso semejante a este, ya que, mediante el registro de la presión del interior de la bomba y el modelo de diagnóstico programado en C, se obtienen estas y otras representaciones que permitirán analizar la velocidad de combustión de la mezcla, variando la proporción de inertes presentes en ella.

3.3. Objetivos

Como ya se viene aventurando en este capítulo, el objetivo principal o general de este documento, es aplicar la metodología experimental de Neher (2017), adaptándola a las necesidades de los nuevos combustibles disponibles en el laboratorio, para calcular la velocidad de combustión laminar en los ensayos planteados.

Se plantean tres objetivos particulares, claramente diferenciados entre sí, los cuales sirven para alcanzar el objetivo general (Ver figura 2)



Figura 2: Pirámide invertida de objetivos

Descripción de objetivos:

1. Realizar una Hoja de Excel: Se usa como herramienta de apoyo en los ensayos, para obtener rápidamente la presión parcial que tiene que alcanzar cada gas, para cumplir las exigencias en la proporción estequiometría de la reacción planteada. También se usa para el cálculo de otras propiedades, detalladas más a fondo en el capítulo 3, dedicado íntegramente a este objetivo.
2. Hacer ensayos: Aprovechar la instalación del departamento para realizar combustiones con diferentes mezclas, hechas con los gases disponibles, variando la cantidad de gases inertes presentes en ella. Conectado a un sensor piezoeléctrico, se tiene un osciloscopio que registrará la presión en función del tiempo en el interior de la bomba a partir del momento de la ignición. Con el fichero de datos recogido en cada ensayo, se estará en condiciones de implementarlo en el modelo de diagnóstico para llegar al objetivo general.
3. Usar el modelo de diagnóstico: Hacer uso de un programa, de código C en el cual está implementado un modelo de diagnóstico que es capaz de, a partir del fichero del registro temporal de la presión para cada ensayo, de unas hipótesis asentadas y de un planteamiento de ecuaciones, relacionar mediante representaciones gráficas diferentes variables de los experimentos.
4. Medida de la velocidad de combustión laminar, C_t : A partir de los resultados de salida del modelo de diagnóstico, se obtiene la velocidad de combustión laminar del ensayo, definiéndose como:

“Dada una mezcla combustible, gaseosa, premezclada y homogénea, de una composición determinada y en unas condiciones de temperatura (T_{sq}) y presión (p), se define la velocidad de combustión laminar de dicha mezcla, como la velocidad de propagación, relativa a la mezcla sin quemar, de un frente de llama unidimensional, plano, adiabático y estable.” (Lafuente, 2008, p.10)

En la figura 3 se describe de forma esquemática las partes del interior de la bomba esférica, ocupada por una mezcla combustible, y el instante después de la ignición provocada entre los dos electrodos.

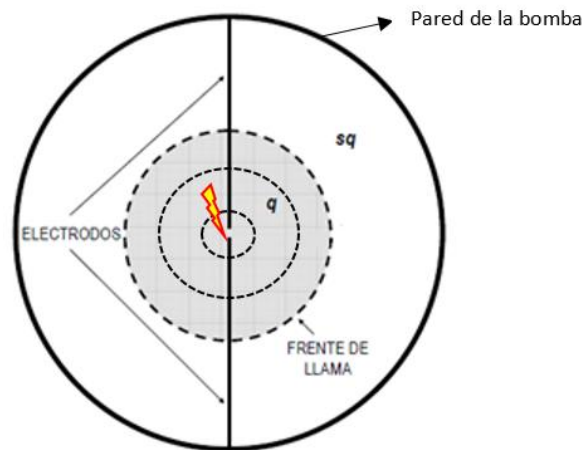


Figura 3: Representación del frente de llama dentro de la bomba [Adaptado de Lafuente, 2008, p. 129]

Al inicio de la ignición, comienza el avance del frente de llama dividiendo de forma concéntrica a la esfera en dos zonas: el sector que envuelve el frente de llama corresponde con la zona de mezcla quemada (q) y estará caracterizada por su temperatura T_q variable en el tiempo. El segundo sector, el que envuelve al frente de llama y está acotado por las paredes de la BCVC, es la que corresponde con la zona de mezcla no quemada (nq) y estará caracterizada por su temperatura T_{nq} o T_{sq} también variable en el tiempo. El frente de llama dividirá las dos zonas hasta que este choque contra las paredes de la esfera o simplemente hasta que la combustión finalice por sí sola.

3.4. Desarrollo y estructura del trabajo

El presente trabajo fin de grado trata de ampliar el conocimiento actual que existe en los procesos de combustión de combustibles gaseosos sustitutos de los convencionales, como pueden ser la gasolina o el diésel, mediante ensayos de diferentes combustibles, de este tipo, en una bomba esférica a volumen constante, usando una metodología de ensayos

y herramientas de cálculo informatizadas. Una de las herramientas es una técnica experimental de diagnóstico basada en el registro de unas variables y propiedades de la combustión, que nos sirven, una vez tratadas, para conocer aquellos aspectos que se crean oportunos para el estudio de la combustión.



Figura 4: Esquema de la estructura del TFG

En referencia a la figura 4, este documento está dividido en 9 capítulos, tres de ellos representados en la figura y que forman parte del grueso de este TFG.

El cuarto capítulo, se ocupa de describir la instalación del departamento donde se ha trabajado para conseguir los objetivos. Se detallan los componentes que incorpora la bomba esférica, el sistema de llenado con las botellas de aporte de los distintos gases disponibles, el osciloscopio como sistema de registro de la presión, los diferentes equipos de medida de temperatura y presión, y la metodología de ensayo seguida.

En el quinto capítulo se exponen todas las variables que se han tenido en cuenta para realizar la hoja de Excel y se explica para que nos sirve de apoyo a la hora de realizar los ensayos. Contiene todo lo referente a las variables de entrada y salida, el cómo se ha estructurado para ayudarse en el proceso de llenado y todos los cálculos que tiene que realizar para dar el resultado requerido que se usará para proceder a ensayar las combustiones.

En el último de los capítulos aquí descritos, en el sexto de ellos, se analizan todos los resultados, analizando, comentando y razonando cómo influyen las propiedades

Estudio de la influencia de las propiedades termodinámicas de los inertes en el proceso de combustión premezclada

termodinámicas de los gases inertes en el proceso de combustión de mezclas combustibles gaseosas.

Capítulo 4: **INSTALACIÓN** **EXPERIMENTAL**

4. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL

Con el fin de aislar el proceso que se produce en la cámara de combustión de un motor convencional, se diseñó y construyó la instalación que en este capítulo se describe. A través de la BCVC (Bomba de combustión a volumen constante) se puede aislar el proceso de ignición de un MCIA (Motor de combustión interna alternativo), pudiéndose así hacer un análisis más cómodo de los ensayos con combustibles que se lleven a cabo. La instalación de la BCVC ubicada en el laboratorio de Máquinas y motores térmicos del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Uva (Figura 5), se creó con un objetivo claro, hacer un registro de la presión en las combustiones, con diferentes mezclas, para posteriormente analizar la velocidad de combustión de los ensayos.



Figura 5: Fotografía de la instalación del laboratorio

La instalación se puede dividir en cuatro grandes partes:

1. Almacenamiento y suministro de gases y aire
2. Sistema de encendido
3. Medida y registro de señales
4. Cámara de combustión esférica a volumen constante (BCVC)

Más adelante se describirán con detalle cada uno de los elementos que forman parte de la instalación. A continuación, en la figura 6 se ha creado un esquema de la instalación para que se tenga presente durante todo este capítulo, ya que servirá para la comprensión del funcionamiento de la instalación.

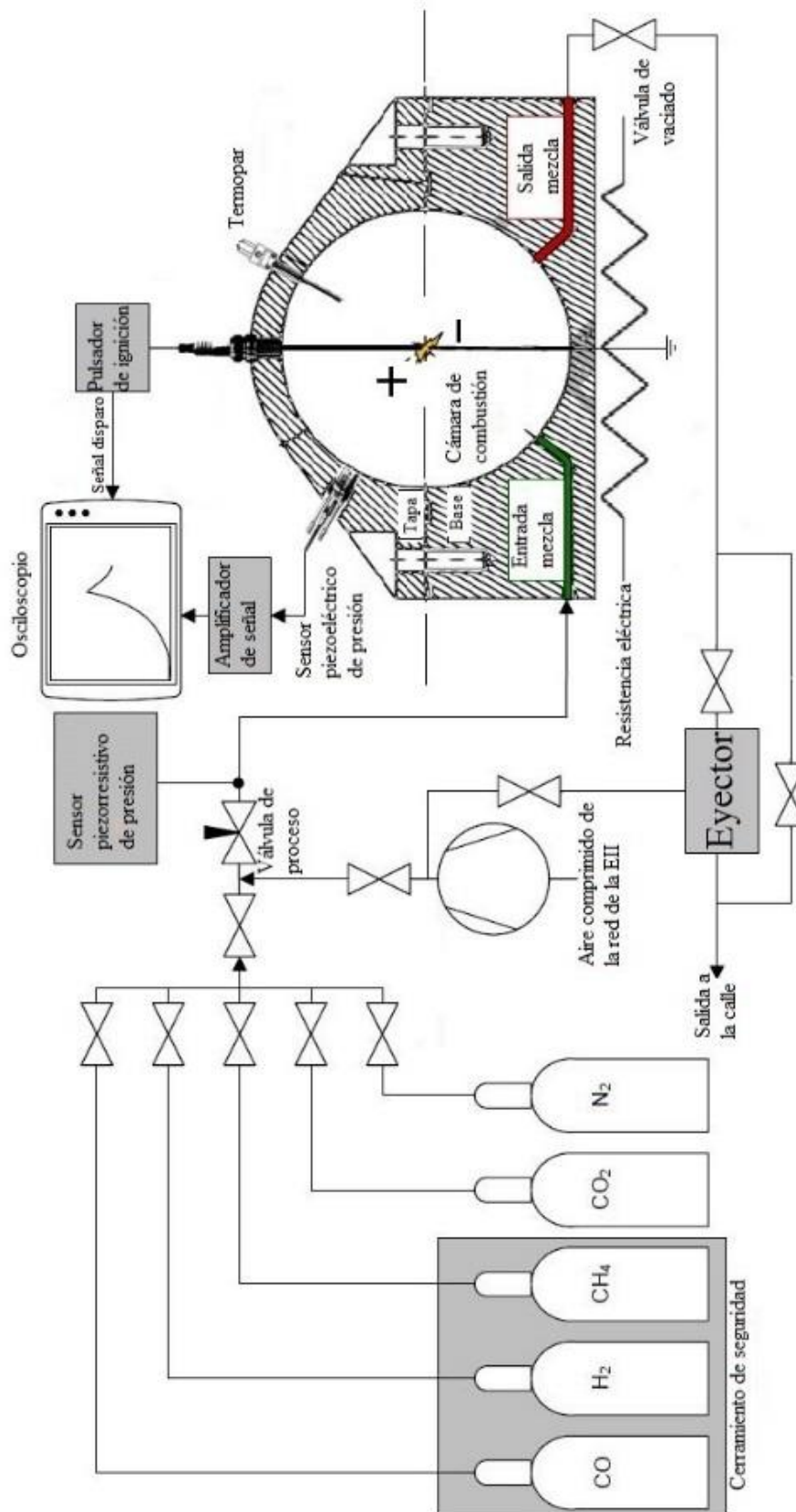


Figura 6: Esquema de la instalación del laboratorio [Adaptado de Neher, 2017, p. 54]

La instalación tiene como objetivos:

- ✓ Sintetizar una determinada mezcla combustible en su interior a una presión y temperatura, de hasta 200 bar de presión durante una combustión y 600 K de temperatura en condiciones iniciales.
- ✓ Tener control mediante un pulsador sobre el momento de ignición de la mezcla que provocará la combustión de esta.
- ✓ Registrar temporalmente la presión en el interior de la BCVC, a partir del momento de la ignición y hasta que se considere que la combustión ha terminado, mediante un osciloscopio.

4.1. Bomba de combustión a volumen constante (BCVC)

La BCVC es la parte de la instalación donde ocurre todo el grueso de los ensayos (Ver figura 7). Fabricada en acero inoxidable y con apariencia exterior de iglú, tiene una cavidad esférica en su interior de 4.19 litros donde se realizan las mezclas gaseosas para posteriormente, mediante el salto de chispa producido en su centro geométrico, someterlas a reacción. La esfericidad del interior permite que el frente de llama, esférico también y originado con la ignición, fluya libremente hasta que, si continua, choque con la pared de acero a los 100 mm de radio.

Cómo se muestra en la figura 8, la BCVC está formada por dos partes: La tapa y la base. Se unen entre sí a través de 18 tornillos de M10 repartidos formando una circunferencia en la cara de contacto de ambas piezas, quedando la cámara aislada del exterior gracias a una junta anular de grafito. Las dimensiones exteriores de la BCVC, no son relevantes para proseguir con la descripción de la instalación, pero pueden ser consultadas en la Tesis de Lafuente, 2008, p. 96.

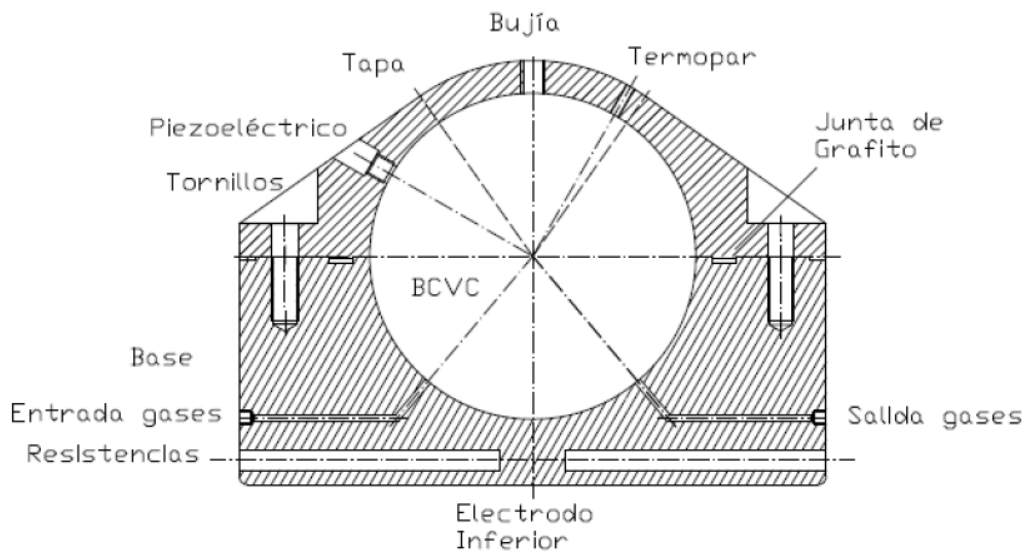


Figura 7: Corte transversal del perfil de la BCVC [Reyes, 2008, p.87]

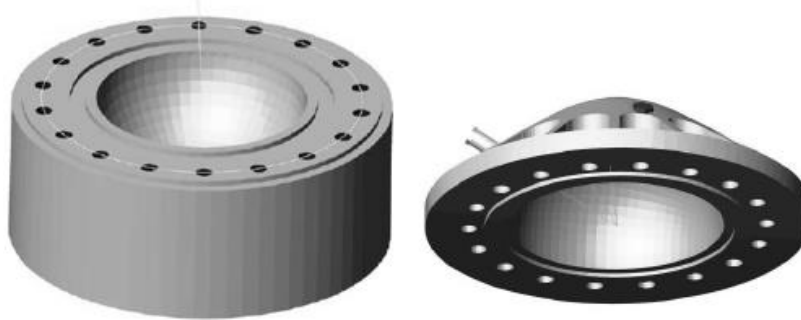


Figura 8: Modelo 3D de la BCVC [Reyes, 2008, p.89]



Figura 9: Aspecto exterior de la BCVC sin aislante (izquierda) y con aislante (derecha)

Siguiendo con la descripción destacamos varios aspectos, de cada una de las dos partes:

1. Base de la BCVC: Se encuentra una parte de la cavidad esférica interior.

Sirve para darle sustento a la BCVC y tiene las siguientes particularidades:

- ✓ Tiene dos orificios, opuestos entre sí, que servirán como extracción de los gases combustionados y para introducir los gases frescos.
- ✓ Posee un agujero roscado en su parte inferior que sirve para introducir el electrodo de polo negativo de tal manera que el final de este quede muy próximo al centro geométrico de la esfera interior.
- ✓ Ostenta un asiento anular en la cara superior que sirve para colocar la junta de unión de ambas piezas
- ✓ Tiene cuatro huecos exteriores en la superficie inferior que sirven para introducir las cuatro resistencias que sirven para calentar la BCVC a la temperatura requerida en cada ensayo.
- ✓ Posee cuatro pernos en la cara inferior para anclar la bomba a la mesa.

2. Tapa de la BCVC: Particularidades:

- ✓ Cuenta con un agujero roscado en su parte superior y opuesto al del inferior de la base, que sirve para roscar la bujía y su electrodo. Será el polo positivo del sistema del salto de chispa.
- ✓ Tiene un taladro pasante y roscado de M14, realizado radialmente a 30° respecto de la horizontal, que sirve para colocar el captador de presión piezoeléctrico.
- ✓ Tiene otro taladro pasante y roscado de M3, realizado radialmente a 60° respecto de la horizontal y opuesto al anterior, en el que se acopla el termopar de medida de temperatura de la bomba.
- ✓ Posee diversos agujeros que sirven de acceso para diversas funciones, pero que durante la realización de los ensayos que aquí se llevan a cabo permanecerán sellados.

- ✓ Cuenta con un escalón anular en su parte inferior. que sirve para encajar y aprisionar la junta que une ambas partes.

4.2. Sistema de abastecimiento de gases

Una parte fundamental para el funcionamiento y seguridad de la instalación son los sistemas de almacenamiento, control y distribución de gases combustibles, gases combustionados y aire comprimido. La instalación dispone de: metano (CH_4), hidrógeno (H_2), dióxido de carbono (CO_2), nitrógeno (N_2) y monóxido de carbono (CO) almacenados en botellas de alta presión (hasta 200 bar) distribuidas por una empresa autorizada. El aire comprimido (hasta 7 bar) es suministrado desde la red de aire de la EII.

Para tener el control sobre la distribución de cada uno de los gases tenemos un panel de control, con una llave para cada gas, donde se regula la cantidad de gas que entra a la BCVC (Ver figura 10). Para la evacuación de los gases combustionados se tiene un orificio exclusivo para ello con su llave de paso correspondiente.



Figura 10: Panel de control de la instalación

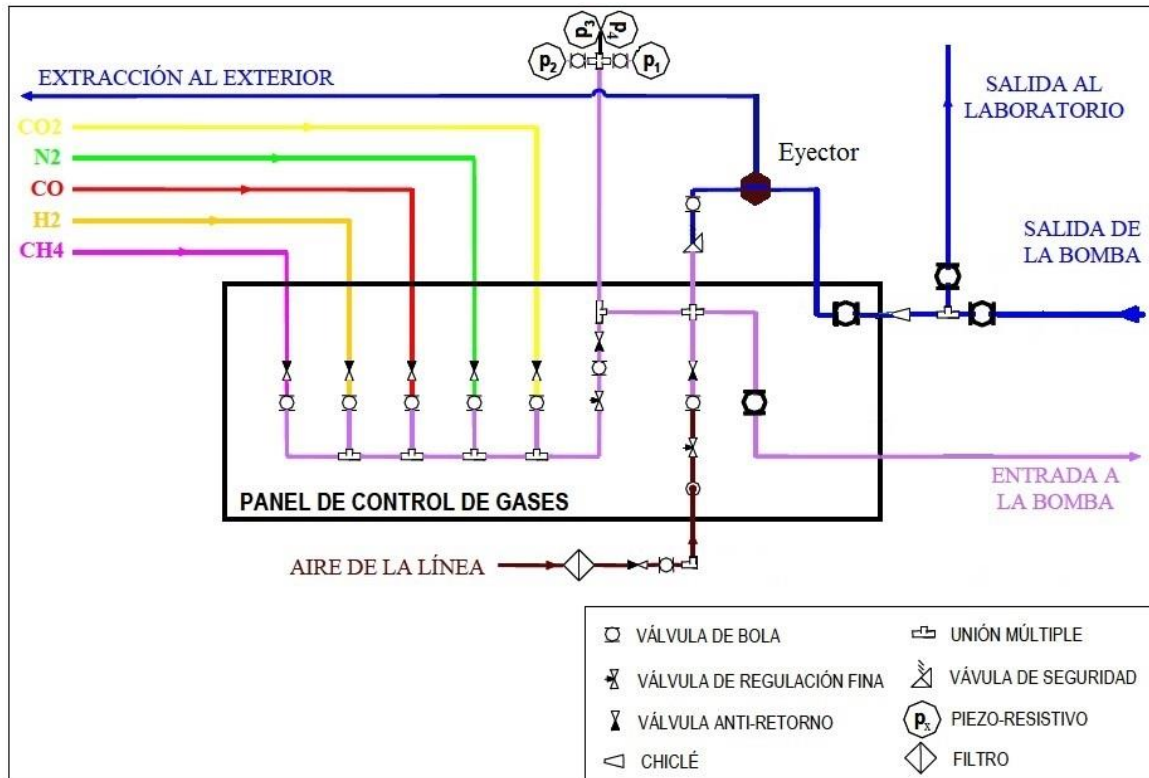


Figura 11: Esquema del panel de control [Adaptado de Lafuente, 2008, p. 99]

En la figura 11 se esquematiza el panel de control, para ayudar a entender como es el sistema de distribución y control de caudal en todos sus tramos. Detalles:

- ✓ En la parte superior de la figura, están representados los 4 captadores de presión, cada uno válido para un rango de escala de presiones, que toman la medida de dentro de la BCVC durante la fase de llenado.
- ✓ Eyector: Ubicado en la línea de salida de la bomba y simbolizado con un hexágono está la “unión T” que hace posible el vaciado del interior de la cámara por el efecto Bernoulli. Una depresión producida por la incorporación de aire comprimido a alta velocidad al conducto de salida exterior, crea un flujo de gases que salen de la bomba, produciéndose así el efecto de vacío.

Ante el riesgo que conlleva trabajar con gases a alta presión y con mezclas tóxicas, existen unas determinadas medidas de seguridad que dejan prácticamente anuladas las posibilidades de sufrir un accidente, y que en caso de que este ocurriese, minimizar su efecto.

La instalación cuenta con válvulas de alta presión (hasta 400 bar) y válvulas anti-retorno en los tramos de tubería que sean de aporte para la bomba.

También dispone de dos sensores que activan una alarma si detectan una determinada concentración de metano, hidrogeno o monóxido de carbono peligrosa para desempeñar el trabajo con seguridad.

Como se muestra en la figura 12, se cuenta con tres armarios donde están ubicadas las botellas de metano, hidrógeno y monóxido de carbono. Para evitar el riesgo de explosión, para los dos primeros, y el riesgo de intoxicación por inhalación, del último, estos armarios cuentan con un sistema de ventilación forzada y dos captadores de presión, uno a cada lado del extractor, que activan una alarma si detectan una variación no contemplada en el intervalo de funcionamiento con seguridad.

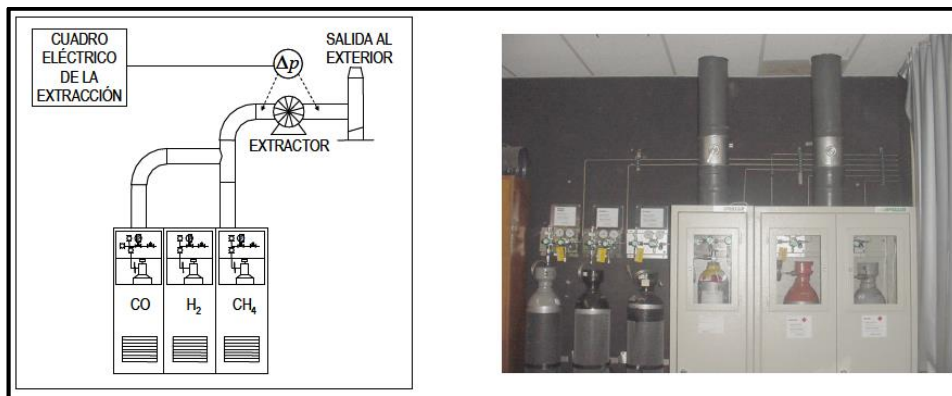


Figura 12: Esquema del sistema de extracción (izquierda) y fotografía del sistema de almacenamiento de los gases (derecha) [Lafuente, 2008, p. 101]

4.3. Sistema de ignición

Con el sistema de encendido o ignición es posible producir la chispa que salta entre los dos electrodos para iniciar la combustión. La instalación eléctrica se compone de: (Ver figura 13)

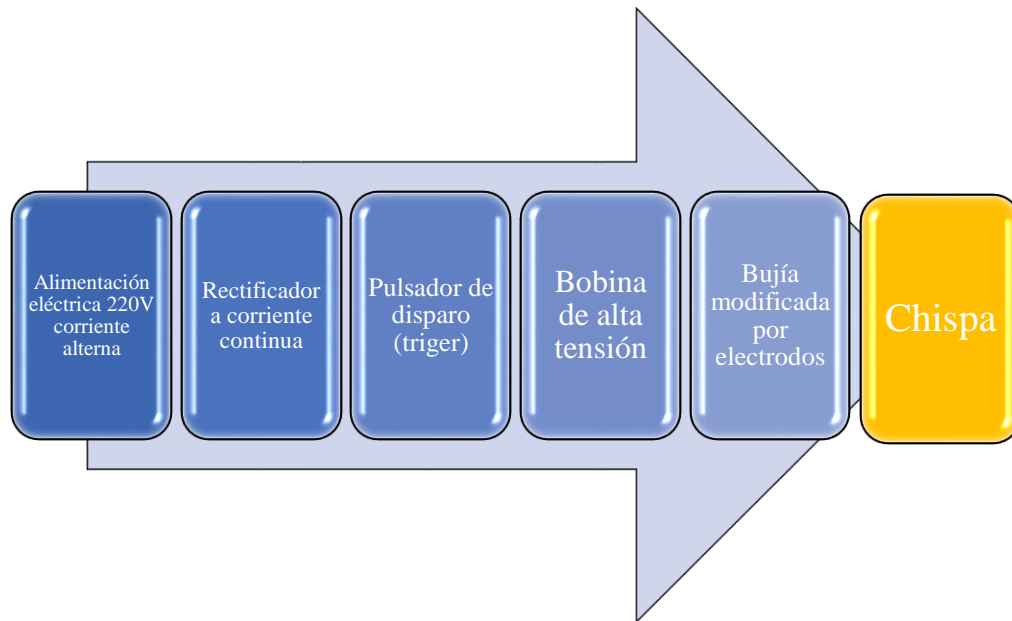


Figura 13: Partes de la instalación del sistema de encendido

Se alimenta el rectificador o transformador con corriente alterna (CA) a 220 V, proveniente de la red eléctrica de la escuela, para transformarla en corriente continua (CC) a 12 V. El pulsador dejará pasar esta corriente a la bobina la cual generará alta tensión para que la chispa se produzca entre los electrodos por diferencia de potencial.

La bujía ha sido modificada para que la chispa se produzca en el centro geométrico de la cámara esférica. Para ello se la ha incorporado de una varilla, que será el polo positivo, de longitud suficiente para que el extremo de esta quede muy cercano al centro de la BCVC. En el extremo opuesto tiene roscado el otro electrodo, que será el polo negativo, también de longitud suficiente para que la punta quede aproximadamente en el centro de la esfera. Cuando haya una descarga eléctrica el espacio entre electrodos servirá para crear una diferencia de potencial y generar una chispa (Ver figura 14)

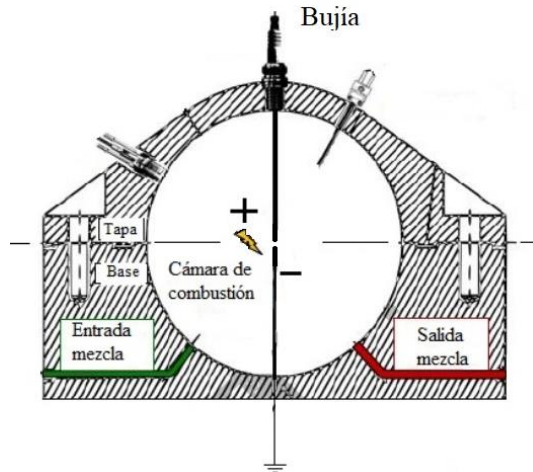


Figura 14: Posición de electrodos dentro de la BCVC

La distancia entre electrodos coincidirá, como mínimo, con el diámetro del volumen crítico para que se produzca la combustión de una mezcla, y por tanto se inicie el avance del frente de llama.

4.4. Sistema de producción de calor

Para alcanzar la temperatura requerida para las condiciones del ensayo, se le ha incorporado a la BCVC de 4 resistencias, de tipo cartucho y de 1 KW de potencia cada una, dispuestas en los 4 huecos de la base realizados para tal fin.

Un controlador PID (Proporcional Integrativo Derivativo), ver figura 15, gestiona el proceso de calentamiento de las resistencias: Un relé de estado sólido cierra o abre, el circuito eléctrico de calentamiento en función de si el PID detecta una temperatura menor en la pared de la bomba respecto a la de consigna, o viceversa.



Figura 15: Controlador PID modelo. Valor inferior: Temperatura de consigna. Valor superior: Variable de entrada recibida del termopar. Modelo: Toho TTM-104

Cabe destacar que la bomba se encuentra aislada térmicamente con lana de roca, permitiéndonos así conseguir mantener una temperatura estable durante los ensayos minimizando las pérdidas de calor.

4.5. Instrumentación

La magnitud física a la que se hace referencia durante este apartado es la presión. Será una variable fundamental, ya que será controlada, medida y registrada, dependiendo de la fase en la que nos encontremos, tanto en el período de llenado de la BCVC, cómo en el proceso de combustión de la mezcla.

La instalación cuenta diversas herramientas que hacen posible la medida y adquisición de datos de presión. Este apartado se puede dividir en dos partes: Sensores de presión y registro de la presión:

4.5.1. Captadores de presión

1. Para la medida de la presión absoluta de llenado de la bomba se utilizan cuatro transductores de presión piezorresistivos.

Un captador de presión piezorresistivo, traduce en señal de tensión, la variación en la resistencia eléctrica que experimentan algunos materiales provocada por un cambio de presión en el medio.

Están acoplados al tramo de tubería que conecta con el conducto de entrada a la esfera y la lectura se hace a través del display (Ver figura 16). Estos sensores son usados para tener control de la presión que alcanza cada gas que entra a la BCVC, ya que, gracias al método de las presiones parciales, se obtiene una relación directa de la cantidad de gas introducido con la medida de la presión.

Cada uno de los cuatro sensores están diseñados para trabajar en un rango de presiones, ya que, si se excede en esto, podemos dañarlos. Por eso se han provisto de llaves de bola cada uno de los captadores, con el fin de cerrar el paso de gas en caso de que la presión de este superase el valor límite de trabajo. Se cuenta con cuatro límites de presión de trabajo que son, uno para cada captador: 1, 2.5, 10 y 25 bar, aunque rara vez se sobrepasarán los 2 bar en el proceso de llenado. Por supuesto la medida que más se ajusta a la realidad es la que da el transductor que contenga el valor instantáneo de presión medida. Por ejemplo: Si se quiere alcanzar un valor de 1.5 bar en el sistema, se procederá a cerrar la llave del captador de 1 bar y se cogerá lectura del sensor de 2.5 bar.



Figura 16: Aspecto de los transductores piezorresistivos (Derecha) en la instalación y su display (izquierda) para lectura

2. Para hacer posible el registro temporal de la presión la instalación cuenta con un transductor piezoeléctrico. Este tipo de captadores se basan en la propiedad piezoeléctrica de sus materiales: Cuando se altera la forma (por ejemplo, aplicando una presión) del cristal piezoeléctrico, este se polariza, produciéndose así una diferencia de potencial entre las dos caras opuestas del cristal que es amplificada y medida por el osciloscopio.

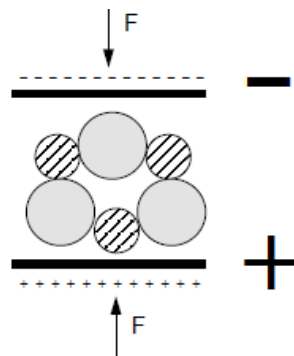


Figura 17: Efecto de una carga F sobre las cargas de un material piezoeléctrico

Este transductor se utiliza para hacer las mediciones de la variación de la presión en el interior de la bomba durante las combustiones. El sensor se encuentra ubicado en un picaje hecho en la tapa de la BCVC, este se mecanizó para que quedase completamente enrasado con la curvatura del interior de la tapa. Cuenta con un sistema de refrigeración líquida que hace que las altas temperaturas alcanzadas en las combustiones y en la pared de la bomba no afecten al registro.



Figura 18: Transductor utilizado: Kistler 7063

4.5.2. Amplificador y registro de presión

1. El transductor piezoeléctrico va conectado a un amplificador de señal, ajusta la tensión de salida del captador, amplificándola, para registrarla posteriormente con el osciloscopio. El amplificador tiene que ser capaz de recibir la tensión acumulada en el transductor sin alterarla, para ello contiene un circuito electrónico compuesto de diodos, resistencias y condensadores que convierte la variación de la carga de entrada en una proporcionalmente ampliada en función de la escala que esté configurada. Los pares de puntos tensión- tiempo leídos por el amplificador, se pasan a pares de puntos presión-tiempo siguiendo la ecuación:

$$P = P_i + E \cdot R \cdot T \cdot V$$

Donde P_i [bar] es la presión inicial que hay en la bomba, E [mV] es la escala escogida, $R \cdot T$ es una constante de valor 112.4 [bar/V] y V [Voltios] es la tensión recibida por el amplificador.



Figura 19: Aspecto del amplificador de la instalación. Modelo: Kistler 5015

2. Por último, y para acabar con la descripción de la instalación, se cuenta con un aparato de registro de la señal de salida del amplificador: un osciloscopio. Es un dispositivo electrónico que registra digitalmente señales de tensión procedentes de sensores. El que está disponible en el laboratorio es un modelo YOKOGAWA DL708E

con 8 módulos de adquisición 701853 HR, que permite adquirir a 100 kHz (hasta 100K datos por segundo) con una resolución de 16 bits.

El inicio del registro se origina con el pulsador de disparo (Figura 20), el cual está conectado a uno de los módulos del osciloscopio para que, a la vez que se inicia la ignición, se comience con la adquisición temporal de valores de tensión enviados desde el amplificador. El registro terminará cuando se haya alcanzado el límite de datos de registro configurado por el usuario.

Finalmente, los datos ya estarán disponibles para ser almacenados en la memoria del osciloscopio y utilizables para ser analizados con un PC.

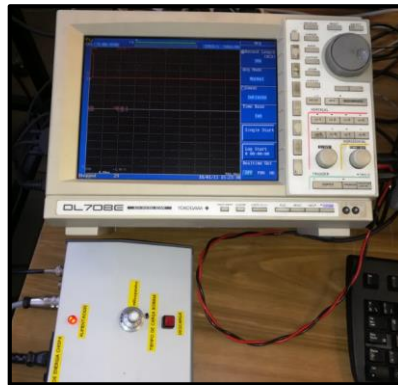


Figura 20: Osciloscopio y módulo de disparo (trigger)

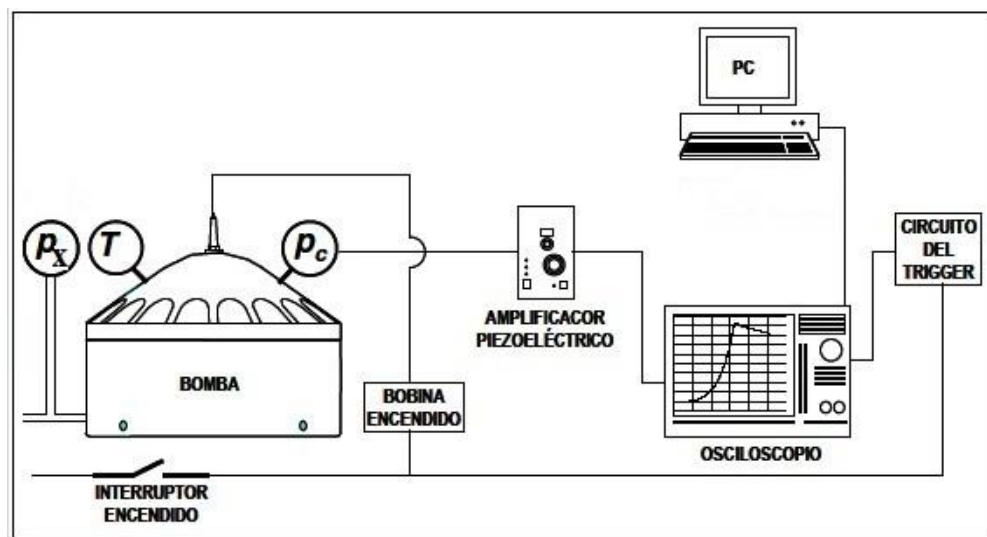


Figura: 21: Esquema de la instrumentación de la instalación [Adaptado de Lafuente, 2008, p.106]

4.6. Metodología de los ensayos

Para la elaboración de las mezclas combustibles se ha seguido un procedimiento universal, valido para todos los ensayos experimentales que se han desarrollado en este trabajo.

La temperatura de las paredes de la BCVC, que se puede variar con el controlador PID descrito en este mismo capítulo, se consignará a 53 °C, Se considerará también la temperatura inicial de las mezclas al inicio de las combustiones, ya que la masa de la mezcla es infinitamente inferior a la masa de la propia bomba por lo que se conseguirá rápidamente el equilibrio térmico entre las paredes de la bomba y la mezcla de gases. Por esto esta temperatura se tomará como la correspondiente a la de los gases no quemados (T_{nq} o T_{sq}).

Las condiciones de limpieza en el interior de la bomba antes de cada ensayo deben ser las óptimas, por eso antes de cada experimento se ha de ventear (insuflar aire por el conducto de entrada y sacarlo por el conducto de salida) y hacer vacío en su interior, mínimo 2 veces cada operación, para que los gases residuales que hayan podido quedar de las combustiones anteriores sean expulsados hacia el exterior y conseguir así que la presión residual que nos quede sea la correspondiente al aire de los venteos. Hacer el vacío en el interior de la BCVC permite bajar la presión y crear un flujo de gases remanentes, aire y vapor hacia el exterior.

Con estos dos pasos, se puede decir que se está en condiciones de comenzar con la fase más importante y laboriosa de los experimentos: el llenado de la BCVC: La cantidad de combustibles e inertes a introducir se determina a través de la hoja de Excel (Desarrollada en el capítulo 5 de este TFG), abierta en el PC del laboratorio, que basándose en unas ecuaciones termoquímicas y con el método de las presiones parciales (también desarrollado en el capítulo 5), obtiene la presión que se ha de alcanzar en cada etapa de llenado del gas correspondiente para cumplir las exigencias de la proporción de la mezcla en función de unas premisas: temperatura de los no quemados (T_{nq}), temperatura de los quemados (T_q), presión residual de aire y presión final de llenado.

Cuando ya se haya completado la fase de llenado del último gas se deja reposar unos 3 minutos para que la mezcla se asiente, se comprueba que el amplificador piezoeléctrico

está en funcionamiento y que el osciloscopio está bien configurado y en espera de disparo (trigger). Conviene dejar encendido el equipo 30 minutos antes de comenzar a usar.

Por último, se pulsa el botón de disparo provocándose el inicio del registro de valores de tensión recogidos por el osciloscopio y la ignición mediante el salto de chispa entre los electrodos. Después de cada ensayo, los registros son almacenados en la memoria con un nombre característico para finalmente ser volcados con LabVIEW al PC y tratados con el modelo de diagnóstico (ver figura 22)

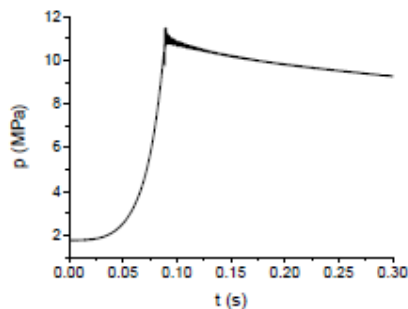


Figura 22: Ejemplo del registro de la presión frente al tiempo en un ensayo

La metodología experimental de ensayos y el objetivo que se persigue con estos se resume a continuación en 7 puntos ordenados cronológicamente:

- ✓ Acondicionamiento del interior de la bomba.
- ✓ Condiciones del ensayo en la hoja Excel.
- ✓ Llenado de la BCVC.
- ✓ Registro temporal de la presión en la combustión mediante el pulsador de disparo.
- ✓ Volcado mediante LabVIEW de datos en un PC.
- ✓ Análisis de los registros mediante el modelo de diagnóstico.
- ✓ Medida de la velocidad de combustión laminar para cada registro.

Capítulo 5: **MÉTODO DE CÁLCULO**

5. MÉTODO DE CÁLCULO

Una parte importante del tiempo invertido para realizar este TFG ha sido empleado en realizar una hoja de Excel que calcule automáticamente una serie de variables que servirán tanto para la realización de los ensayos, como para el cálculo de una serie de propiedades de la mezcla necesarias para el cálculo de la velocidad de combustión laminar.

La hoja de Excel estará todo el rato presente en la elaboración de las mezclas, ya que calcula rápidamente la presión de cada gas de la mezcla planteada, visualizándose así de manera clara y ordenada en el monitor del PC. A largo de todo este capítulo se tratará de desarrollar en cada apartado: estructura del problema y definición de conceptos, síntesis de cálculo y estructura de cálculo en la Hoja de Excel.

5.1. Estructura del problema y definición de conceptos

Planteamiento del problema: a partir de unas variables de entrada o premisas, proporción de gases en la mezcla, presión de llenado, presión residual de la cámara, temperatura de los gases quemados y temperatura de los gases no quemados, y de unos datos o constantes sacados de la web del NIST (National Institute of Standards and Technology), se han de obtener, mediante el método de cálculo aquí descrito, las características necesarias, para la elaboración de la mezcla y para su posterior análisis.

A continuación, se expone un esquema donde se muestra la estructura general del problema de cálculo:

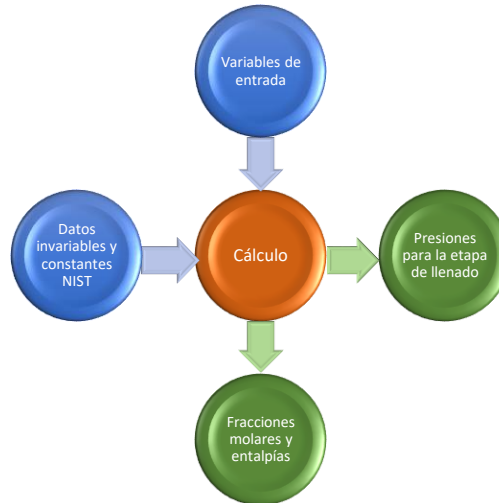


Figura 23: Estructura del problema de cálculo

Seguidamente se hace una descripción de cada uno de los hitos del esquema de la figura para posteriormente comprender, en el siguiente punto, la síntesis de cálculo del problema que se plantea.

5.1.1. Variables de entrada

A la hora de plantear un ensayo, con unas proporciones de gases específicas en la mezcla, se necesita definir aparte otras variables que caracterizarán el ensayo. A continuación, se hace un breve desarrollo de cómo influye cada variable en el proceso.

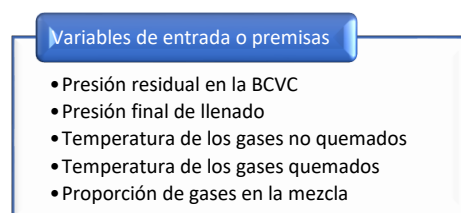


Figura 24: Premisas del problema de cálculo

5.1.1.1. Presión residual

La presión residual (P_r), medida en bares (bar), se corresponde con la presión que queda en la BCVC después de haber hecho dos venteos y dos vaciados. Se asume la hipótesis de que esa presión se corresponde con aire de la red de aire comprimido de la EII y que no queda resquicio en el interior de gases de combustiones anteriores (Es la

composición de la mezcla en el interior de la bomba antes de que se comience con el llenado). Realmente no es una variable como lo pueden ser las demás (que son definidas por el usuario), ya que se toma el valor que marque el display del sensor piezoresistivo, que será variable en función de la presión que quede en ese momento en el interior de la cámara.

5.1.1.2. Presión de llenado

La presión de llenado de la BCVC (P_f), medida en bares (bar), es la presión que se requiere alcanzar al final del llenado de la bomba. Es la presión que se ha de alcanzar en la etapa de llenado, antes de la ignición, con el último gas a introducir en la cámara, o lo que es lo mismo, la presión que tiene la mezcla al inicio de la combustión.

5.1.1.3. Temperatura de los gases no quemados y de la BCVC

La temperatura de la BCVC, medida en grados celsius ($^{\circ}\text{C}$), se corresponde con la temperatura de las paredes de la bomba durante todo el proceso experimental y con la temperatura de los gases no quemados (T_{nq} o T_{sq}) al inicio de la combustión. Recuérdese figura 3.

Se consignará a una determinada temperatura y permanecerá invariable durante todos los ensayos, debido a la acción del controlador PID. Pese a que las temperaturas alcanzadas en las combustiones sean muy superiores, la masa de gas presente en la bomba es muy inferior a la masa de la BCVC por lo que se discriminará el efecto de la posible conducción de calor desde la mezcla gaseosa a las paredes de la bomba.

5.1.1.4. Temperatura de los gases quemados

La temperatura de los gases quemados (T_q), introducida en grados celsius ($^{\circ}\text{C}$), se corresponde con una de las dos zonas que divide el frente de llama en la BCVC desde que el proceso de combustión empieza, hasta que finaliza. Recuérdese figura 3.

La temperatura introducida de los gases quemados puede existir o no, ya que dependiendo de la mezcla podrá alcanzar la temperatura consignada o no en función de variables como el poder calorífico, característico de cada combustible. En otras palabras, es la temperatura que alcanzarían los quemados si partiesen de la T_{sq} que se introduce.

Una vez visto a que se refieren estas temperaturas, se puede ver cómo varían ambas a lo largo del tiempo de ignición en la siguiente figura:

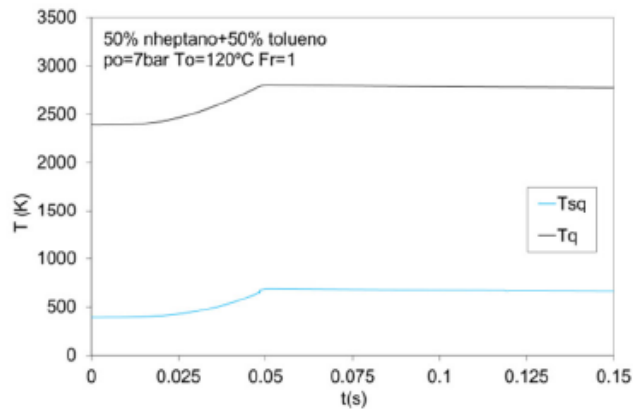


Figura 25: Representación gráfica de T_{nq} y de T_q en función del tiempo para una mezcla y condiciones determinadas [Iglesias, 2015, pág. 164]

5.1.1.5. Proporción de gases en la mezcla

Una de las variables de entrada que más van a caracterizar los valores de velocidad de combustión laminar es la proporción y composición de cada gas en la mezcla.

Los gases disponibles en el laboratorio se pueden dividir en tres grandes grupos:

1. Gases combustibles: Forman parte de la reacción como reactivos y son: H_2 , CO y CH_4 . Se les puede definir como gases susceptibles de ser quemados.
2. Oxidante: Es el comburente de la reacción, sin él no podrá haber reacción. Se corresponde con el O_2 del aire.
3. Inertes: Son los demás gases: N_2 de la botella, N_2 del aire, CO_2 y aire en exceso (aire que no sería necesario para que la combustión fuese completa)

5.1.2. Datos invariables y constantes del NIST

En lo que se refiere a los valores invariables presentes en el problema de cálculo, se hace incapié en ellos con dos apartados:

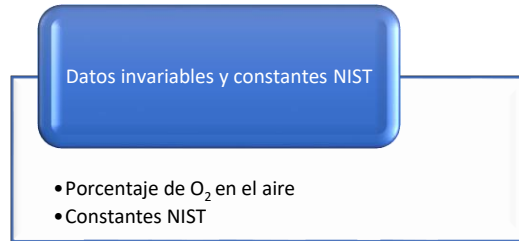


Figura 26: Constantes del problema

5.1.2.1. Porcentaje de O₂ en el aire

Durante todo el problema de cálculo, para simplificar, se está contando con la hipótesis de que el aire está únicamente formado por Oxígeno (O₂) y Nitrógeno (N₂) en una proporción 21%- 79% respectivamente (0.21 y 0.79 en tanto por uno). Esto quiere decir que existe una relación molar de 3.76 o que el aire está compuesto de 3.76 moles de N₂ por cada mol de O₂.

$$\frac{0.79}{0.21} = 3.76 \frac{\text{mol } N_2}{\text{mol } O_2}$$

5.1.2.2. Datos NIST

Los coeficientes que proporciona la web del NIST se muestran en la siguiente figura:

CONSTANTES	T [K]			a	b	c	d	e	f	g	h
CO	298	< T <	1300	25,56759	6,09613	4,054656	-2,671301	0,131021	-118,0089	227,3665	-110,5271
	1300	< T <	6000	35,1507	1,300095	-0,205921	0,01355	-3,28278	-127,8375	231,712	-110,5271
CO2	298	< T <	1200	24,99735	55,18696	-33,69137	7,948387	-0,136638	-403,6075	228,2431	-393,5224
	1200	< T <	6000	58,16639	2,720074	-0,492289	0,038844	-6,447293	-425,9186	263,6125	-393,5224
H2	298	< T <	1000	33,066178	-11,363417	11,432816	-2,772874	-0,158558	-9,980797	172,707974	0
	1000	< T <	2500	18,563083	12,257357	-2,859786	0,268238	1,97799	-1,147438	156,288133	0
	2500	< T <	6000	43,41356	-4,293079	1,272428	-0,096876	-20,533862	-38,515158	162,081354	0
CH4	298	< T <	1300	-0,703029	108,4773	-42,52157	5,862788	0,678565	-76,84376	158,7163	-74,8731
	1300	< T <	6000	85,81217	11,26467	-2,114146	0,13819	-26,42221	-153,5327	224,4143	-74,8731
H2O	500	< T <	1700	30,092	6,832514	6,793435	-2,53448	0,082139	-250,881	223,3967	-241,8264
	1700	< T <	6000	41,96426	8,622053	-1,49978	0,098119	-11,15764	-272,1797	219,7809	-241,8264
N2	100	< T <	500	28,98641	1,853978	-9,647459	16,63537	0,000117	-8,671914	226,4168	0
	500	< T <	2000	19,5	19,88705	-8,598535	1,369784	0,527601	-4,935202	212,39	0
	2000	< T <	6000	35,51872	1,128728	-0,196103	0,014662	-4,55376	-18,97091	224,981	0
O2	100	< T <	700	31,32234	-20,23531	57,86644	-36,50624	-0,007374	-8,903471	246,7945	0
	700	< T <	2000	30,03235	8,772972	-3,988133	0,788313	-0,741599	-11,32468	236,1663	0
	2000	< T <	6000	20,91111	10,72071	-2,020498	0,146449	9,245722	5,337651	237,6185	0

Figura 27: Coeficientes NIST

Para cada compuesto empleado en la realización de los ensayos, le corresponden ocho valores (a, b, c, d, e, f, g y h) en los cuales hay dos o tres intervalos de temperatura para los que se aplica, según a cuál pertenezca, cada uno de ellos.

5.1.3. *Fracciones molares y entalpías*

Las fracciones molares indican la concentración de un soluto (compuesto correspondiente), en una disolución (mezcla)

Las entalpías son un valor propio de cada compuesto y muestran la cantidad de energía presente por la unidad de medida del compuesto que se considere.

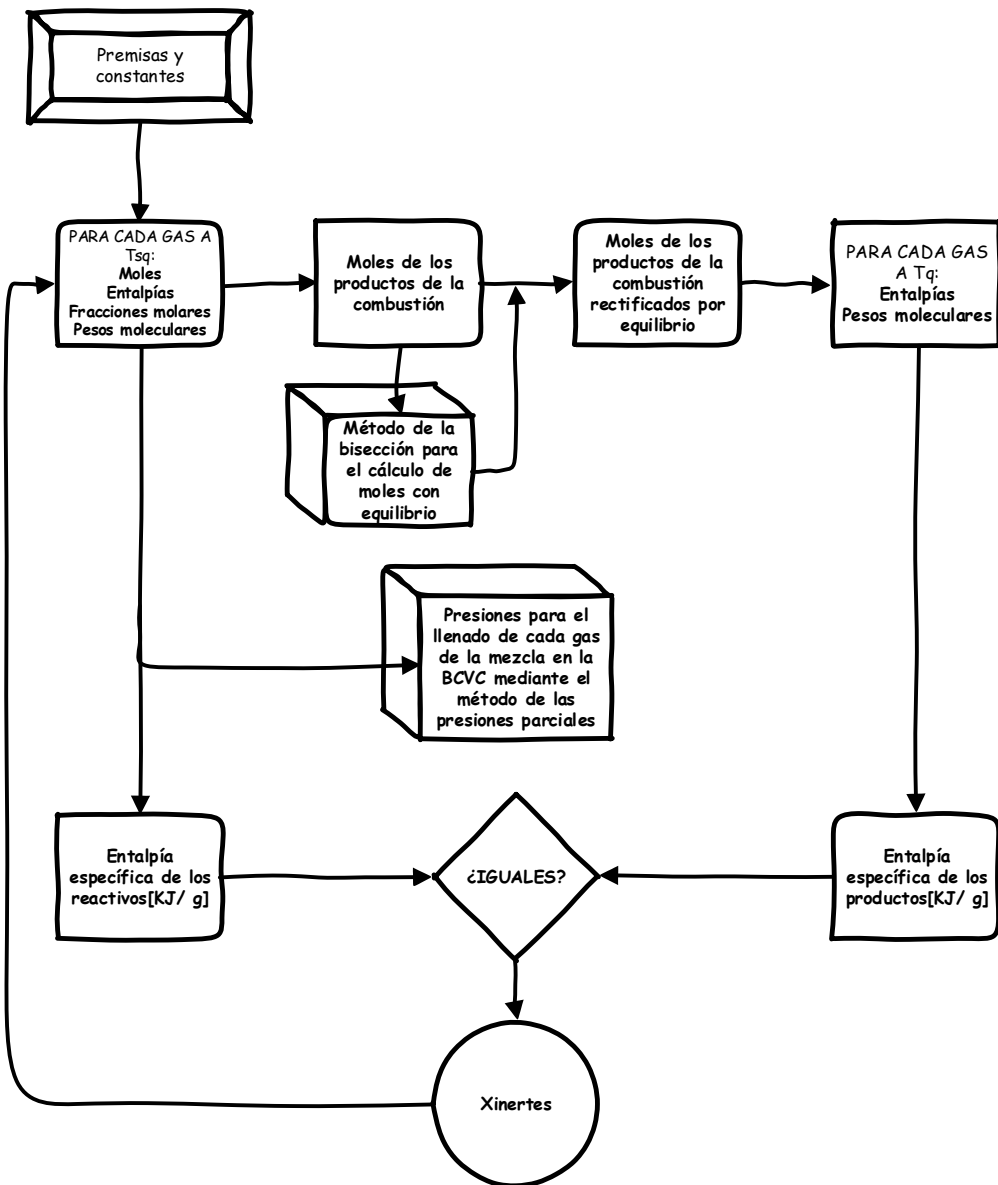
5.1.4. *Presiones parciales de llenado*

La manera de controlar que la composición de cada gas en la mezcla se cumpla, con las premisas impuestas, es usando el denominado método de las presiones parciales. Este método es una técnica de llenado que permite relacionar la composición de la mezcla con la presión que tiene que alcanzar cada gas presente en ella. La manera de controlar que entra la cantidad exacta de gas en la bomba es mediante la lectura de la presión con el display de los sensores piezoresistivos.

5.2. **Síntesis de cálculo**

En este apartado se muestran los razonamientos y las ecuaciones que permiten resolver el problema de cálculo planteado.

Flujograma de cálculos para la resolución del problema:

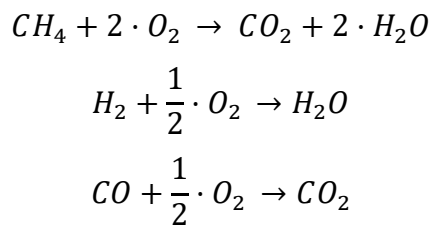


El diagrama muestra de manera gráfica el orden de los cálculos, pudiendo ver a simple vista que variables son dependientes unas de otras de manera directa a través de las flechas que indican el sentido de las operaciones. El cálculo de las variables de salida finales se obtiene de manera iterativa hasta que la condición final (representada por un rombo en el flujograma) se cumpla. A continuación, se va a desarrollar, mediante sub-apartados, la síntesis del problema, desde que se insertan las premisas hasta que se calculan las variables de salida:

5.2.1. Cálculo de coeficientes estequiométricos en la reacción

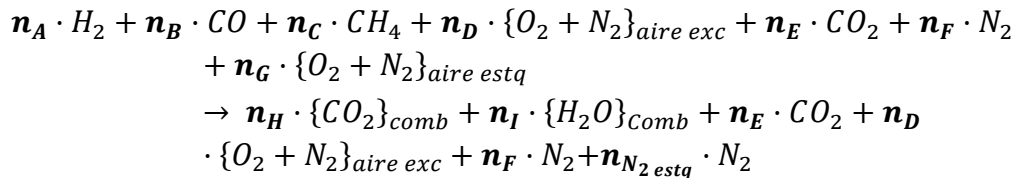
A partir de la proporción introducida de gas i , se calcula la cantidad de sustancia en moles, n_A , n_B , n_C , n_D , n_E , n_F , n_G , n_H , y n_I , correspondientes a las sustancias que forman parte de la mezcla ensayada y que reaccionarán o no al salto de chispa en función de la naturaleza de cada una: Inerte, comburente o combustible.

Antes se necesita hacer el cálculo del O_2 estq y del N_2 estq, teniendo en cuenta el porcentaje de O_2 y N_2 en el aire y los coeficientes estequiométricos de las siguientes reacciones de oxidación:



También, se necesita conocer los valores de O_2 exc y de N_2 exc, que se calculan a partir de la proporción de aire en exceso fijada, el porcentaje de O_2 y N_2 en el aire y el $X_{inertes}$.

Con todo esto se puede plantear la reacción de combustión genérica por la que se rigen todos los ensayos realizados con los compuestos disponibles.



Ecuaciones de cálculo para n_i :

$$n_A = \frac{A}{A + B + C + \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2\ estq} + \left\{ 3.76 \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2\ estq} \right\}_{N_2\ estq}}$$

$$n_B = \frac{B}{A + B + C + \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2\ estq} + \left\{ 3.76 \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2\ estq} \right\}_{N_2\ estq}}$$

n_C

$$= \frac{C}{A + B + C + \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} + \left\{ 3.76 \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} \right\}_{N_2 \text{ estq}}}$$

$n_G = n_{O_2 \text{ estq}} \cdot O_2 + n_{N_2 \text{ estq}} \cdot N_2$ donde:

$n_{O_2 \text{ estq}}$

$$= \frac{\left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}}}{A + B + C + \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} + \left\{ 3.76 \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} \right\}_{N_2 \text{ estq}}}$$

$n_{N_2 \text{ estq}}$

$$= \frac{\left\{ 3.76 \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} \right\}_{N_2 \text{ estq}}}{A + B + C + \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} + \left\{ 3.76 \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot A + \frac{1}{2} \cdot B + 2 \cdot C \right\}_{O_2 \text{ estq}} \right\}_{N_2 \text{ estq}}}$$

$n_D = n_{O_2 \text{ exc}} \cdot O_2 + n_{N_2 \text{ exc}} \cdot N_2$ donde:

$$n_{O_2 \text{ exc}} = \frac{D \cdot 0.21}{\{E + F + D\} \cdot X_{\text{inertes}}}$$

$$n_{N_2 \text{ exc}} = \frac{D \cdot 0.79}{\{E + F + D\} \cdot X_{\text{inertes}}}$$

$$n_E = \frac{E}{\{E + F + D\} \cdot X_{\text{inertes}}}$$

$$n_F = \frac{F}{\{E + F + D\} \cdot X_{inertes}}$$

$$n_H = n_B + n_C$$

$$n_I = n_A + 2 \cdot n_C$$

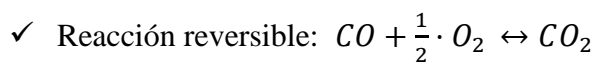
Donde $X_{inertes}$ es la variable puesta en juego en las iteraciones del problema, como se ve en el flujograma general. Se define cómo la proporción de inertes presentes en la mezcla en tanto por uno. Este valor se fijará en función del error que se produzca en la iteración j procedente de la diferencia entre la entalpía específica de los reactivos y la entalpía específica de los productos. La proporción de inertes será la definitiva cuando en la iteración se produzca un error menor que 10^{-11} .

$$X_{j \text{ inertes}} = X_{j-1 \text{ inertes}} - \frac{h_{prod} - h_{react}}{10}$$

5.2.1.1. Cálculo de cantidades rectificadas por equilibrio químico

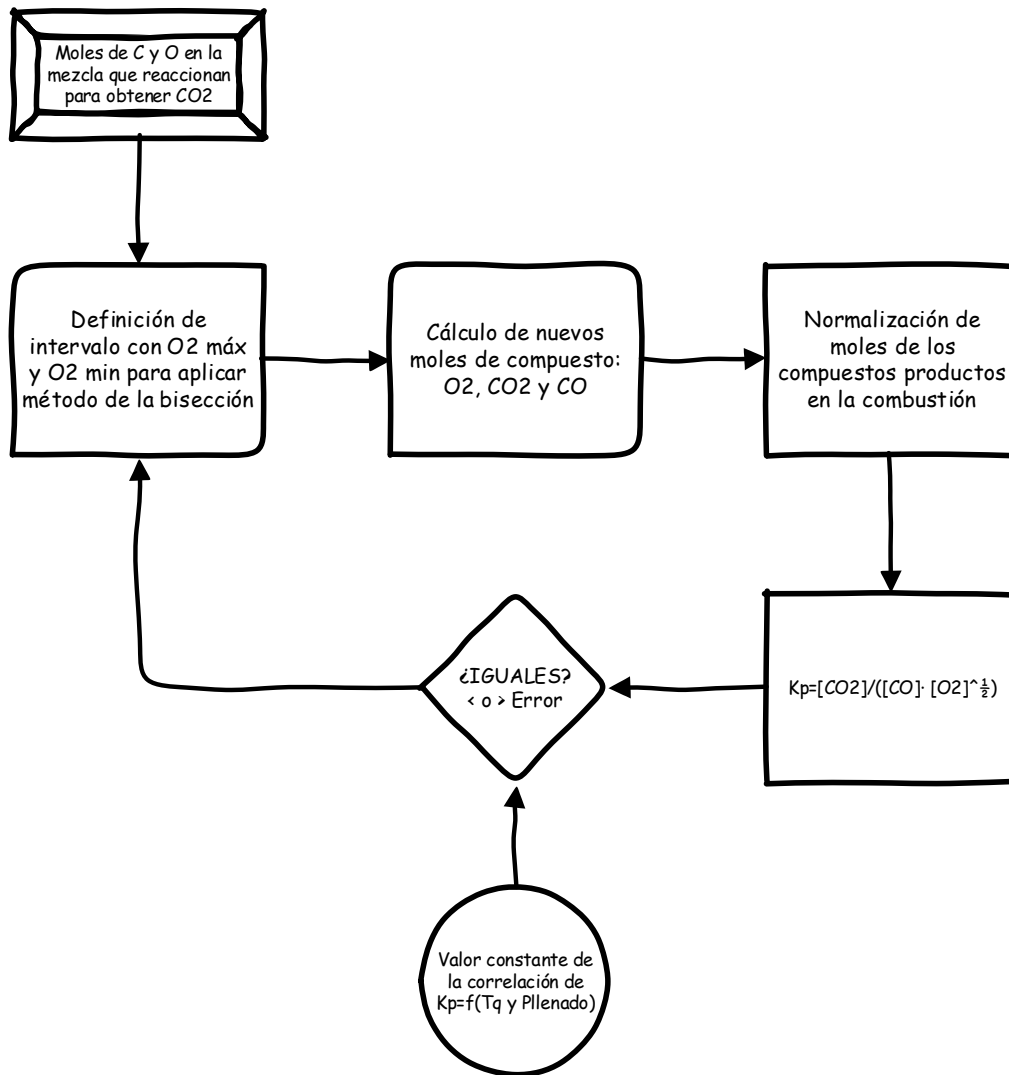
En la reacción de oxidación del monóxido de carbono hay que tener presente que es una reacción reversible y por tanto se necesita hacer una estimación de cómo afecta el equilibrio químico a la T_q de los reactivos y productos de la combustión y en definitiva a las cantidades de todos los gases de la mezcla.

Para ello se emplea el método matemático de la bisección, el cual permite calcular, por un lado, las nuevas cantidades de CO , O_2 y CO_2 y a partir de estas, normalizar las demás.



Seguidamente se muestra un flujograma de bloques donde se esquematiza el problema de equilibrio químico.

Flujograma de iteración n del método de la bisección:



Para resolver el problema se cuenta con dos ecuaciones atómicas y una ecuación de equilibrio químico. Con las dos primeras, cómo se muestra en el flujograma, se fijarán los extremos del intervalo de la cantidad de moles para la sustancia O_2 y se estará en condiciones para hacer una estimación de cantidad de sustancia para los compuestos que forman parte de la reacción reversible: CO , O_2 y CO_2 . Siguiendo el orden de cálculo del flujograma, lo siguiente sería la normalización de los moles de compuestos productos de la combustión de acuerdo a los nuevos moles calculados. Seguidamente, por comparación, se obtiene el error existente entre el valor de K_p (ecuación de equilibrio químico) calculado con los nuevos valores de moles y $K_{p\text{ corr}}$ resultado de aplicar una correlación específica de la reacción reversible estudiada, en función de la T_q y la presión de llenado de la bomba. Finalmente, la iteración no sigue si el error conseguido está dentro del valor admisible definido por el usuario, la iteración continuará de manera contraria,

aplicándose el Teorema de Bolzano al intervalo y volviéndose a iniciar el método de la bisección con el intervalo de n_{O_2} acotado, hasta que el error en la comparación sea válido.

Ecuaciones para el cálculo:

Átomos totales de C en la reacción reversible:

$$K_C = n_B + n_H + n_E$$

Átomos totales de O en la reacción reversible:

$$K_O = n_B + 2 \cdot n_H + 2 \cdot n_E + 2 \cdot n_{O_2 exc}$$

Límites de intervalo inicial $[a_1, b_1]$, para 1ª iteración de estimación de moles de O_2 :

$$a_1 = n_{O_2 min} = \frac{K_O}{2} - K_C \text{ y } b_1 = n_{O_2 max} = \frac{K_O - K_C}{2}$$

Moles de compuestos de la reacción reversible:

$$n_{O_2} = \frac{n_{O_2 max} + n_{O_2 min}}{2} \text{ (mitad del intervalo)}$$

$$n_{CO_2} = K_O - K_C - 2 \cdot n_{O_2}$$

$$n_{CO} = -K_O + 2 \cdot K_C + 2 \cdot n_{O_2}$$

Moles totales en los productos de la reacción de combustión de la mezcla:

$$n_{T prod} = n_{N_2 estq} + n_I + n_{N_2 exc} + n_F + n_{O_2} + n_{CO_2} + n_{CO}$$

Se normalizan los moles de los productos de la reacción de combustión de la mezcla

$$n_{O_2 norm} = \frac{n_{O_2}}{n_{T prod}}$$

$$n'_H = \frac{n_{CO_2}}{n_{T prod}}$$

$$n'_B = \frac{n_{CO}}{n_{T prod}} \text{ (Vease que puede volverse a producir CO)}$$

$$n_{N_2 estq norm} = \frac{n_{N_2 estq}}{n_{T prod}}$$

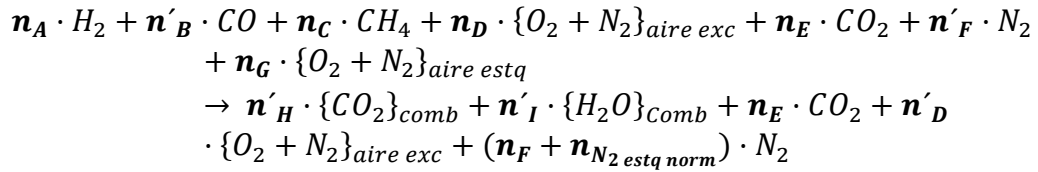
$$n_{N_2 exc norm} = \frac{n_{N_2 exc}}{n_{T prod}}$$

$$n'_I = \frac{n_I}{n_{T prod}}$$

$$n'_F = \frac{n_F}{n_{T prod}}$$

$$n'_D = n_{O_2 norm} \cdot O_2 + n_{N_2 exc norm} \cdot N_2$$

Quedando así la reacción de combustión con sus nuevos coeficientes estequiométricos por la aplicación de equilibrio químico a la reacción reversible:



Por otra parte, hay que calcular la constante de equilibrio de la reacción reversible, mediante una correlación ($K_{p\ corr}$) y mediante la molaridad de la mezcla (K_p), para posteriormente comparar y obtener la diferencia o error.

$$\begin{aligned} K_{p\ corr} &= f(P_f, T_q) \rightarrow \\ K_{p\ corr} &= \sqrt{\frac{P_f \cdot 10^5}{11325.05} \cdot 10^{C_1 + C_2 + C_3 + C_4}} \quad (I) \quad \text{donde:} \\ C_1 &= -0,00415302 \cdot \log\left(\frac{T_q + 273}{1000}\right) \\ C_2 &= \frac{14,8627}{\frac{T_q + 273}{1000} - 4,75746} \\ C_3 &= 0,124699 \cdot \frac{T_q + 273}{1000} \\ C_4 &= 0,00900227 \cdot \left(\frac{T_q + 273}{1000}\right)^2 \\ K_p &= \frac{n'_H}{n'_B \cdot [n_{O_2\ norm}]^{\frac{1}{2}}} \quad (II) \end{aligned}$$

Condición (I) = (II): $K_{p\ corr} = K_p$

$$K_{p\ corr} = \frac{n'_H}{n'_B \cdot [n_{O_2\ norm}]^{\frac{1}{2}}} = error$$

Si el error está dentro del intervalo admisible: $error < 10^{-11}$ el cálculo de n_{O_2} es válido y por lo tanto el cálculo de las cantidades de productos es válido. De lo contrario se aplica el teorema de Bolzano al intervalo:

$$[a_1, b_1]$$

$$Si\ error < 0 \rightarrow a_2 = a_1\ y\ b_2 = n_{O_2}$$

$$Si\ error > 0 \rightarrow a_2 = n_{O_2}\ y\ b_2 = b_1$$

Se definen los nuevos extremos para el intervalo de cálculo y la iteración vuelve a empezar: $[a_2, b_2]$

5.2.2. Cálculo de entalpías

A través de los coeficientes facilitados por el NIST (Figura 27) y la aplicación de la siguiente ecuación, también aportada por la misma fuente:

$$h_i^0 - h_{298.15}^0 = f(a, b, c, d, e, f, h)$$
$$h_i^0 - h_{298.15}^0 = a \cdot T + b \cdot \frac{T^2}{2} + c \cdot \frac{T^3}{3} + d \cdot \frac{T^4}{4} - \frac{e}{T} + f - h$$

$$\text{Donde: } h_{298.15}^0 = h$$

$$h_i^0 = a \cdot T + b \cdot \frac{T^2}{2} + c \cdot \frac{T^3}{3} + d \cdot \frac{T^4}{4} - \frac{e}{T} + f$$

Se obtienen las entalpías de formación específicas de cada gas en función de T_{sq} y de T_q

Una vez seleccionadas las entalpías específicas de cada compuesto de la mezcla en función de su temperatura, se calcula la entalpía total de cada uno:

- ✓ Reactivos + inertes a T_{sq} : $h_{i \text{ react}} = h_i^0 \cdot n_i$ [KJ]
- ✓ Productos de la combustión + inertes a T_q : $h_{i \text{ prod}} = h_i^0 \cdot n_i$ [KJ]

5.2.3. Masa molecular de cada compuesto

Es necesario calcular la masa molecular de cada compuesto presente en la mezcla; para ello si se multiplica el peso molecular de cada compuesto por el número de moles de cada uno obtenemos la masa de gas i (m_i) en gramos [g]. Cabe destacar que hay que diferenciar entre:

- ✓ Reactivos + inertes: $m_{i \text{ react}} = P_{m_i} \cdot n_i$ [g]
- ✓ Productos de la combustión + inertes: $m_{i \text{ prod}} = P_{m_i} \cdot n_i$ [g]

5.2.4. Entalpía específica de la mezcla

El problema de cálculo iterativo, tiene como fin encontrar el valor que iguala la entalpía específica, medida en KJ/g, de los productos con la de los reactivos de la reacción de combustión. Para ello se tiene en cuenta la Ley de Lavoisier o la ley de conservación en una reacción química, donde la masa entre los reactivos y los productos se conserva, quedando así la ecuación energética de la que se extrae el error (*err*) producido en la iteración j :

$$\frac{h_{react}}{m_{T\ react}} = \frac{h_{prod}}{m_{T\ prod}} = err; \left[\frac{KJ}{g} \right] \text{ donde:}$$

$$h_{react} = h_A + h_B + h_C + h_D + h_G + h_E + h_F \text{ [KJ]}$$

$$h_{prod} = h_{B'} + h_{N_2\ est\ norm} + h_{H'} + h_{I'} + h_{D'} + h_{F'} \text{ [KJ]}$$

$$m_{T\ react} = m_A + m_B + m_C + m_D + m_G + m_E + m_F \text{ [g]}$$

$$m_{T\ prod} = m_{B'} + m_{N_2\ est\ norm} + m_{H'} + m_{I'} + m_{D'} + m_{F'} \text{ [g]}$$

Ese error será admitido cuando tenga un valor menor que 10^{-11} , lo que hará que el proceso iterativo detenga el cálculo de $X_{inertes}$ y por lo tanto las entalpías sean aproximadamente iguales cumpliéndose de esta manera la Ley de Lavoisier.

5.2.5. Fracciones molares

Otra variable necesaria para el cálculo de las presiones de llenado es la fracción molar de cada gas (x_i). Definirá la composición de la mezcla sin quemar por lo que será la composición válida para el llenado y por tanto la composición que se usará para aplicar el método de las presiones parciales en la fase de llenado de la BCVC.

Para su cálculo es necesario conocer la concentración de moles de compuesto i de la mezcla sin reaccionar (reactivos e inertes), quedando de la siguiente manera:

$$x_i = \frac{n_i}{n_{T\ react}} = \frac{n_i}{\sum n_i} \left[\frac{\text{moles de compuesto } i}{\text{moles totales}} \right]$$

Por lo tanto: $\sum x_i = 1$

Particularizando en la reacción de combustión de la mezcla:

$$n_{T\ react} = n_A + n_B + n_C + n_D + n_E + n_F + n_G \text{ donde:}$$

$$n_G = n_{O_2\ estq} \cdot O_2 + n_{N_2\ estq} \cdot N_2$$

$$n_D = n_{O_2\ exc} \cdot O_2 + n_{N_2\ exc} \cdot N_2$$

Para cada gas reactivo e inerte:

$$x_A = \frac{n_A}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_B = \frac{n_B}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_C = \frac{n_C}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_E = \frac{n_E}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_F = \frac{n_F}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_{O_2} = \frac{n_{O_2 \text{ estq}} + n_{O_2 \text{ exc}}}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_{N_2} = \frac{n_{N_2 \text{ estq}} + n_{N_2 \text{ exc}}}{n_{T \text{ react}}}$$

$$x_{\text{Aire}} = \frac{x_{O_2}}{0.21}$$

5.2.6. Presiones parciales en la BCVC

A partir de las fracciones molares de gas i y mediante la aplicación de la Ley de Dalton de las presiones parciales, se obtiene la presión parcial que produce cada compuesto de la mezcla en la BCVC:

$$P_i = P_{i-1} + P_f \cdot x_i$$

Siendo para el problema que nos compete hasta $i=6$ (CO, CH₄, N₂, CO₂, H₂, Aire)

$$P_1 = P_r + P_f \cdot x_1$$

$$P_2 = P_1 + P_f \cdot x_2$$

$$P_3 = P_2 + P_f \cdot x_3$$

$$P_4 = P_3 + P_f \cdot x_4$$

$$P_5 = P_4 + P_f \cdot x_5$$

$$P_6 = P_5 + P_f \cdot x_6$$

5.3. Estructura de cálculo en la hoja de Excel

En este apartado se va a hacer una breve descripción de cómo se ha implementado y distribuido el problema de cálculo en la hoja de Excel. Esta sección va a relacionar cada hito del esquema de la figura 23 con cada parte de la vista general de la hoja de cálculo.

CONSTANTES	T (K)	A	B	C	D	E	F	G	H	h(Taq) [kJ/mol]	h(Tc) [kJ/mol]	
CO	298 <T<	1300	25.56759	6.09613	4.054656	-2.671301	0.131021	-118.0089	227.3665	-110.5271	-109.71255	-46.15779
	1300 <T<	6000	35.1507	1.300095	-0.205921	0.01355	-3.28278	-127.8375	231.712	-110.5271	-106.24175	-43.85288
	298 <T<	1200	24.99735	53.18696	-33.69137	7.948387	-0.136638	-403.6075	228.2431	-393.5224	-392.47335	-283.00938
CO2	1200 <T<	6000	58.16639	2.720074	-0.492289	0.038844	-6.447293	-425.9186	263.6125	-393.5224	-387.04042	-285.51111
	298 <T<	1000	33.066178	-11.363417	11.432816	-2.772874	-0.158558	-9.980797	172.707974	0	0.80553	62.14341
	1000 <T<	2500	18.563083	12.257357	-2.859786	0.268238	1.97799	-1.147438	156.288133	0	-0.54426	62.43560
CH4	2500 <T<	6000	43.41356	-4.293079	1.272428	-0.096876	-20.533862	-38.515158	162.081354	0	38.41126	62.44197
	298 <T<	1300	-0.703029	108.4773	-42.52157	5.862788	0.678565	-76.84376	158.7163	-74.8731	-73.86468	74.15819
	1300 <T<	6000	85.81217	11.26467	-2.114146	0.13819	-26.42221	-153.5327	224.4143	-74.8731	-43.93365	74.88870
H2O	500 <T<	1700	30.092	6.832314	6.793435	-2.53448	0.082139	-250.881	223.3967	-241.8264	-240.88860	-155.18811
	1700 <T<	6000	41.96426	8.622053	-1.49978	0.098119	-11.15764	-272.1797	219.7809	-241.8264	-223.83235	-154.82925
	100 <T<	500	28.98641	1.853978	-9.647459	16.63537	0.000117	-8.671914	226.4168	0	0.81137	135.25049
N2	500 <T<	2000	19.5	19.88705	-8.598335	1.369784	0.527601	-4.935202	212.39	0	0.76471	66.01159
	2000 <T<	6000	35.51872	1.128728	-0.196103	0.014662	-4.55376	-18.97091	224.981	0	6.63454	66.01255
	100 <T<	700	31.32234	-20.23531	57.86644	-36.50624	-0.007374	-8.903471	246.7945	0	0.82017	-7.07460
O2	700 <T<	2000	30.03235	8.772972	-3.988133	0.788313	-0.741599	-11.32468	236.1663	0	1.16306	69.57706
	2000 <T<	6000	20.91111	10.72071	-2.020498	0.146449	9.245722	5.337651	237.6185	0	-15.65968	69.56344

Presión final de llenado [bar]		1		CALCULO EQUILIBRIO												Calcular
Presión residual [bar]	0.0755	Kelvin	326	326	0.326	átomos C	0.130928	O2prueba	0.009182	0.00324	Kp	103.26053	Error	6.046E-12		
temperatura quemados [°C]	53	2273	2.273	átomos O	0.268237	Para media	CO2prueba	0.118945	0.119701	ResulO2m	0.0091821	ResulO2mi			0.0091821	
Temperatura quemados [°C]	2000	2273	2.273	CO2max_ini	0.068655	0.009182	Coprueba	0.011963	0.012053	ResulO2mi	0.0091821	ResulO2mi	0.0091821			
Porcentaje de O2 en aire	21.0084	0.21008	0.21008	CO2min_ini	0.003191	0.009182	Suma	0.933683	Suma	0.933683	Suma	0.933683	Suma			
	Proporción	Cantidad calculada	Cantidades definitivas	h(Tsq)	nr	h(Tsq)	Peso Reactivos	Moles en los productos	Productos Equilibrio	h(Tq)	nr	h(Tq)	Peso Productos	RESULTADO		
H2	1		0.0578704	0.805526	0.046616	0.115741	0	0	0	62.4356	0	0	0	entalpia de los reactivos		
CO	1		0.0578704	-103.713	-6.34311	1.62037	0	0	0.012053	-43.8529	-0.52883	0.337657	0	-0.565206		
CH4	1		0.0578704	-73.8647	-4.27458	0.925926	0	0	0	74.8887	0	0	0	Entalpia de los productos		
O2 est.	3	11.28	0.1736111	0.820167	0.14239	5.555956	0	0	0	63.56344	0	0	0	-0.565206		
N2 est.	11.28	0.6527778	0.811371	0.529645	18.27778	0.652778	0.656928	66.01255	43.36548	18.39398	Xinertes					
CO2 comb.							0.115741	0.119701	-285.511	-34.176	5.266851	0.0455617				
H2O comb.							0.173611	0.174715	-154.823	-27.051	3.144867					
Aire exco.	1													Diferencia		
O2 exceso	0.21008	0.0031908	0.820167	0.002617	0.102099	0.003191	0.00324	63.56344	0.642798	0.235636	-8.12E-11					
N2 exceso	0.78992	0.019966	0.811371	0.009734	0.335906	0.019967	0.012073	66.01255	0.796962	0.338041						
CO2	1		0.0151872	-392.473	-5.96058	0.668238	0.015187	0	-285.511	0	0					
N2	1		0.0151872	0.811371	0.012322	0.425242	0.015187	0.015294	66.01255	1.008921	0.427946					
Xinertes	0.04556															
Composición sin quemar		Composición de llenado		ORDEN		Fracciones		Presiones								
H2=	0.055349	H2=	0.055349	CO	0	0.0755										
CO=	0.055349	CO=	0.055349	CH4	0	0.0755										
CH4=	0.055349	CH4=	0.055349	N2	0	0.0755										
O2=	0.190037	Aire	0.804303	CO2	0	0.0755										
N2=	0.650331	N2	0.014525	H2	0.253195	0.3269347										
CO2=	0.014525	CO2	0.014525	Aire	0.746805	1										
H2O=	0															

Figura 28: Vista general de la hoja de cálculo para un ejemplo

5.3.1. Variables de entrada

Las premisas del ensayo son introducidas por el usuario según las exigencias del mismo:

Presión final de llenado[bar]	Valor
Presión residual [bar]	Valor
Temperatura inquemados [°C]	Valor
Temperatura quemados [°C]	Valor

Figura 29: Celdas de introducción de valores de las premisas en la hoja de Excel

En la figura 30 se pueden ver las celdas correspondientes a los gases disponibles en el laboratorio, al aire y a los gases resultantes de la combustión. Las celdas señaladas con la etiqueta VALOR serán las que se puedan modificar según el criterio que se quiera aplicar, por el contrario, las celdas sin etiqueta serán las que la hoja Excel calcule automáticamente en relación a las otras.

	Proporción
H2	Valor A
CO	Valor B
CH4	Valor C
O2 estequiométrico	
N2 estequiométrico	
CO2 combustión	
H2O combustión	
Aire exceso	Valor D
O2 exceso	
N2 exceso	
CO2	Valor E
N2	Valor F

Figura 30: Celdas para la introducción de valores de proporción en la hoja de Excel

5.3.2. Datos invariables y constantes NIST

Las constantes del portal web NIST se han distribuido por columnas para en función del gas y de la temperatura que le corresponda, facilitando de tal manera el cálculo de las entalpías de formación.

CONSTANTES	T(K)	A	B	C	D	E	F	G	H	
CO	298 < T <	1300	25.56759	6.09613	-4.054656	-2.671301	0.131021	-118.0089	227.3665	-110.5271
	1300 < T <	6000	35.1507	1.300095	-0.205921	0.01355	-3.28278	-127.8375	231.712	-110.5271
CO2	298 < T <	1200	24.99735	55.18696	-33.69137	7.948387	-0.136638	-401.6075	228.2431	-393.5224
	1200 < T <	6000	58.16639	2.720074	-0.492289	0.038844	-6.447293	-425.9186	263.6125	-393.5224
H2	298 < T <	1000	33.066178	-11.363417	11.432816	-2.772874	-0.158558	-9.980797	172.707974	0
	1000 < T <	2500	18.563083	12.257357	-2.859786	0.268238	1.97799	-1.147438	156.288133	0
CH4	298 < T <	6000	43.41356	-4.293079	1.272428	-0.096876	-20.533862	-58.515258	162.081354	0
	1300 < T <	6000	-0.703029	108.4773	-42.52157	5.862788	0.678565	-76.84376	158.7163	-74.8731
H2O	298 < T <	6000	85.81217	11.26467	-2.114146	0.13819	-26.42221	-153.5327	224.4143	-74.8731
	500 < T <	1700	30.092	6.832514	6.793435	-2.53448	0.082139	-250.881	223.3967	-241.8264
N2	298 < T <	6000	41.96426	8.622053	-1.49978	0.098119	-11.15764	-272.1797	219.7809	-241.8264
	100 < T <	500	28.98641	1.853978	-9.647459	16.63537	0.000117	-8.671914	226.4168	0
O2	500 < T <	2000	19.5	19.88705	-8.598535	1.369784	0.527601	-4.935202	212.39	0
	2000 < T <	6000	35.51872	1.128728	-0.196103	0.014662	-4.55376	-18.97091	224.981	0
O2	100 < T <	700	31.32234	-20.23531	57.86644	-36.50624	-0.007374	-8.903471	246.7945	0
	700 < T <	2000	30.03235	8.772972	-3.988133	0.788513	-0.741599	-11.32468	236.1663	0
	2000 < T <	6000	20.91111	10.72071	-2.020498	0.146449	9.245722	5.337651	237.6185	0

Figura 31: Constantes NIST

Composición sin quemar		Composición de llenado	
H2*	0.055349	H2	0.055349
CO*	0.055349	CO	0.055349
CH4*	0.055349	CH4	0.055349
O2*	0.163097	Aire	0.804903
N2*	0.650331	N2	0.014525
CO2*	0.014525	CO2	0.014525
H2O*	0		

Figura 34: Tablas de composición

Mediante la de la izquierda se informa de la composición por separado de O₂ y N₂, y mediante la otra se indica de la composición conjunta que forman: Aire.

5.3.5. Presiones para la etapa de llenado

A través de la hoja de Excel se informa al usuario de la presión que se tiene que alcanzar con el gas que se esté introduciendo:

ORDEN		Fraciones	Presiones
	CO	0	0.0755
	CH4	0	0.0755
	N2	0	0.0755
	CO2	0	0.0755
	H2	0.253195	0.3206347
	Aire	0.746805	1

Figura 35: Celdas de información de la composición y de la presión de llenado del gas *i*

La figura 35 muestra un ejemplo de cómo la hoja Excel informa al usuario de las presiones que se tiene que alcanzar con cada gas para cumplir con las exigencias de entrada del ensayo. En la columna de la derecha se puede ver que aun que no se tenga composición de un gas, se parte de una presión determinada y fijada en las premisas que recuérdese era la presión residual presente en la bomba correspondiente al aire de la etapa de limpiado y vaciado de combustiones anteriores. Finalmente, el último valor de la columna de presiones se corresponde con el impuesto en la celda de presión final de llenado de la BCVC. Anótese que los valores de las columnas de composición y presiones parciales del ejemplo que se viene describiendo en este apartado no se corresponden con los resultados que se dan con las premisas impuestas.

Existe una macro en la hoja de Excel (Anexo) que ordena de menor a mayor los valores de fracciones molares, para que las presiones sean calculadas acorde al orden de llenado de la BCVC. La macro es activada mediante el botón “ORDEN” de la figura 35.

Capítulo 6:
PLAN DE ENSAYOS,
RESULTADOS Y
ANÁLISIS

6. PLAN DE ENSAYOS, RESULTADOS Y ANÁLISIS

En este capítulo se va a describir todo lo referente a los resultados de los ensayos. En el PC, el modelo de diagnóstico procesa los pares de datos de presión- tiempo de cada combustión, obtenidos del osciloscopio mediante LABView, logrando como resultado tres ficheros de datos:

1. Fichero de extensión *[prs]* el cual recoge los valores numéricos de tensión que obtiene el osciloscopio en el período de combustión de la mezcla.
2. Fichero de extensión *[cfg]* encargado de almacenar el valor de las premisas características de cada combustión y de guardar los datos de configuración del osciloscopio.

Por ejemplo, para uno de los ensayos:

Variables	Valores	Descripción
dt=	0,00001 s	Intervalo de tiempo entre los datos de registro de presión
T0=	53 °C	Temperatura inicial de la mezcla
P0=	1 bar	Presión inicial de la mezcla
Rt=	0,1 m	Radio de la esfera
Npts_Reg=	50 pts	Número de puntos con los que se hace la regresión para interpolar los datos experimentales
t_max=	0.02 s	Tiempo de muestreo
Orden_Pol=	4	Orden del polinomio de interpolación
Orden_Pol_ini=	3	Orden del primer polinomio de interpolación de datos experimentales
Der_Nula_ini=	1	Numero de derivadas nulas del primer polinomio de interpolación de datos experimentales
Npts_Reg_ini=	75 pts	Número de puntos para la regresión inicial
N2=	0.519769	Fracciones molares de gas i $\left[\frac{\text{moles de compuesto } i}{\text{moles totales}} \right]$
O2=	0.138237	
CO2=	0.065522	
H2O=	0.000000	
CO=	0.000000	
H2=	0.276473	
CH4=	0.000000	

3. Fichero de extensión *[res]* o fichero de resultados el cual acumula los valores temporales de todas las variables calculadas por el modelo para obtener Ct. A partir de estos valores se obtienen las representaciones del apartado “Resultados” mediante una hoja de Excel automatizada para tal fin.

VARIABLES QUE RECOGE EL FICHERO DE RESULTADOS:

Variables	Descripción
t	Tiempo
P	Presión experimental
m _q	Masa quemados
u _q	Velocidad de los quemados
u _s	Velocidad de los inquemados
T _q	Temperatura de quemados
T _s	Temperatura de no quemados
v _q	Volumen específico quemados
v _s	Volumen específico inquemados
P _c	Presión interpolada de los datos exp.
dP _c	Derivada de la presión
A _f	Área del frente de llama
C _t	Velocidad de combustión laminar
FVQ	Fracción de volumen quemado
R _f	Radio frente de llama
C _{CO}	Concentración de CO
F _{qL}	Fracción de calor liberado
dF _{qL}	Derivada de la fracción de calor liberado
error	Diferencia entre la presión calculada y la interpolada
T _{ad}	Temperatura adiabática de llama

6.1. Plan de ensayos

La siguiente tabla muestra las premisas de los nueve ensayos que van a servir para posteriormente conseguir los resultados del siguiente apartado.

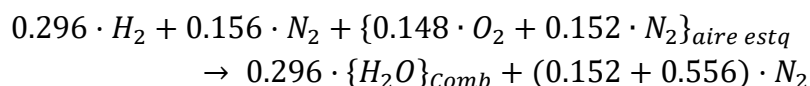
	Nombre de ensayo	Proporción de gases en la mezcla						Fichero	Tsq [°C]	Tq [°C]	Pf [bar]	Pr [bar]
		H2	CO	CH4	CO2	N2	Aire exc.					
Ensayos	1	1	0	0	1	0	0	P_000	53	2000	1	0,0779
	2	1	0	0	0	1	0	P_001	53	2000	1	0,0779
	3	1	0	0	0	0	1	P_010	53	2000	1	0,0779
	4	0	1	0	1	0	0	P_006	53	2000	1	0,0777
	5	0	1	0	0	1	0	P_007	53	2000	1	0,0777
	6	0	1	0	0	0	1					
	7	0	0	1	1	0	0	P_004	53	1950	1	0,0778
	8	0	0	1	0	1	0	P_008	53	1950	1	0,0778
	9	0	0	1	0	0	1	P_009	53	1950	1	0,0778

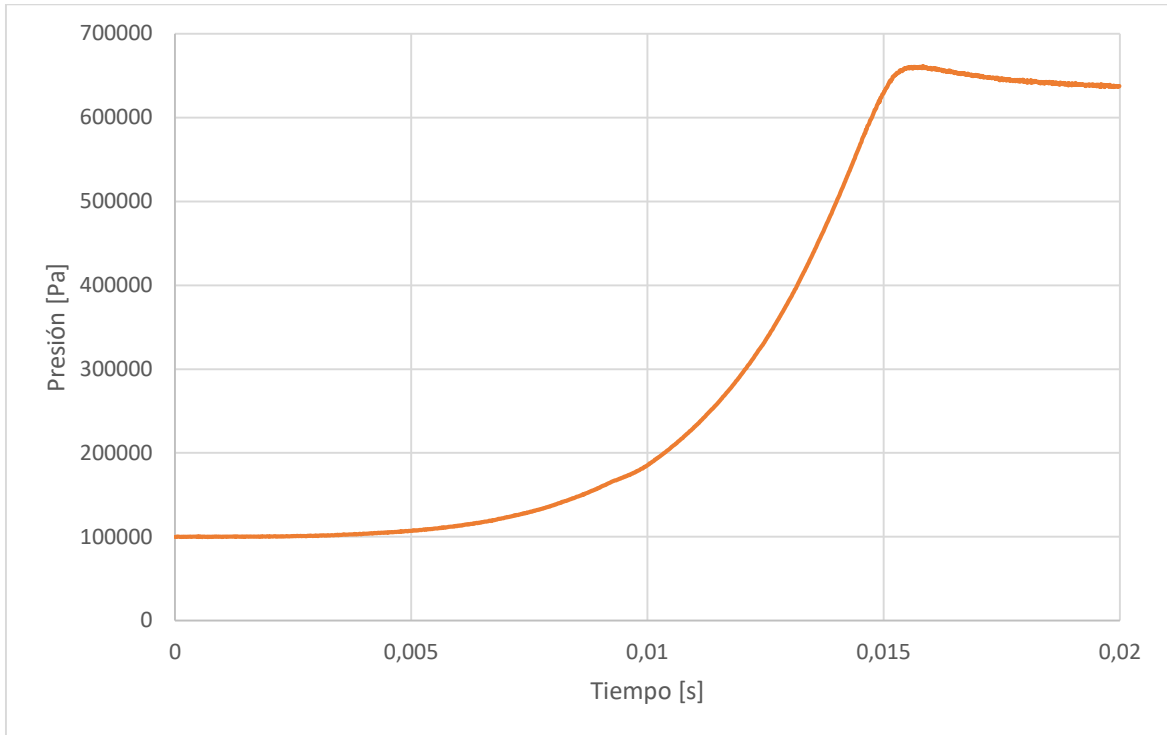
Las intenciones de los ensayos eran haberlos hecho todos a una temperatura de productos quemados de 2000 °C, manteniendo la proporción de inertes, la temperatura de los gases no quemados y la presión final de llenado, pero a la hora de la experimentación se vio que por ejemplo cuando se intentaba ensayar el gas metano con dichas premisas, la proporción de inertes, $X_{inertes}$, era inapreciable para la mezcla, por lo que se decidió bajar la temperatura de los quemados hasta los 1950 °C cómo se indica en la tabla. Con esta temperatura la proporción de inertes era más significativa y por lo tanto más razonable para los análisis.

El último inconveniente que se encontró, fue en la experimentación del monóxido de carbono con aire en exceso, la combustión no se iniciaba con las premisas iniciales por lo que se decidió que ese ensayo no podía ser analizado a la par que los demás.

6.2. Resultados y análisis

Como preliminares, se van a introducir varias representaciones del mismo ensayo (Ensayo 2) relacionando varias variables con el fin de mostrar un ejemplo general desarrollado extrapolable, salvando las particularidades de cada uno, a los demás experimentos.





Representación 1: Presión en función del tiempo (Ensayo 2)

La representación 1, o curva de resultados, muestra la variación temporal de la presión en el interior de la BCVC. Se observa que la curva comienza con la presión final de llenado de la bomba y como la presión va aumentando por el avance del frente de llama de tal manera que la zona de gases quemados se va expandiendo, comprimiendo la zona de gases sin quemar. La curva culmina con un punto máximo al que le sigue un intervalo de descenso, que coincidirá con el final de la combustión y por lo tanto con la desaparición del frente de llama. En la figura 3 se ejemplifica un registro temporal de presión en una combustión, donde se representan las diferentes zonas de la curva de presión mencionadas anteriormente:

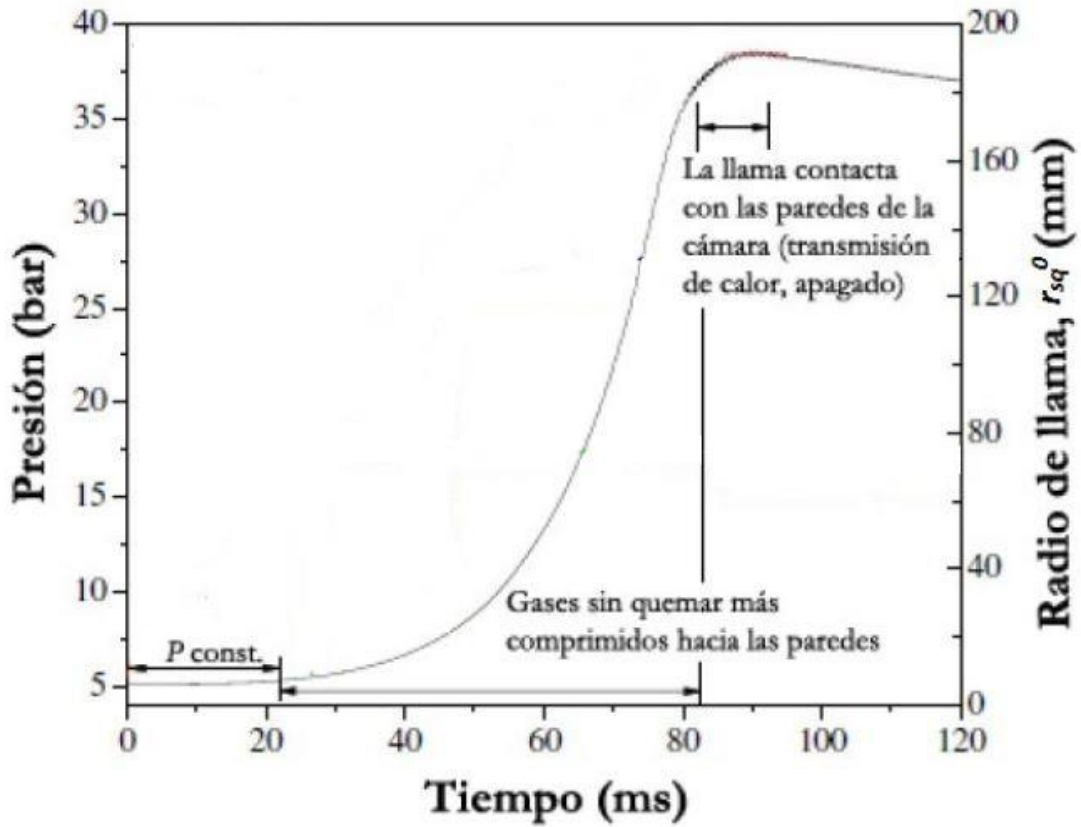
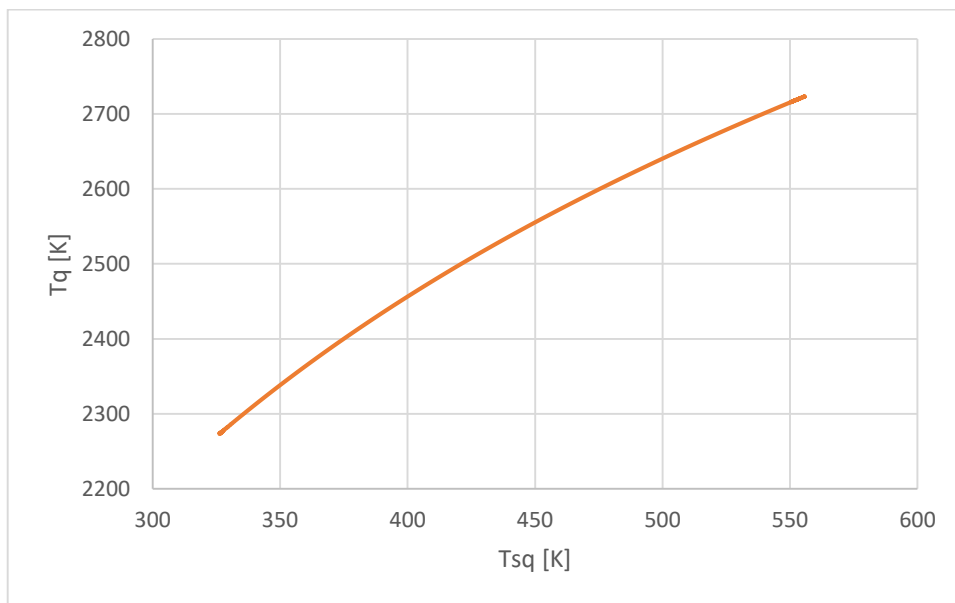
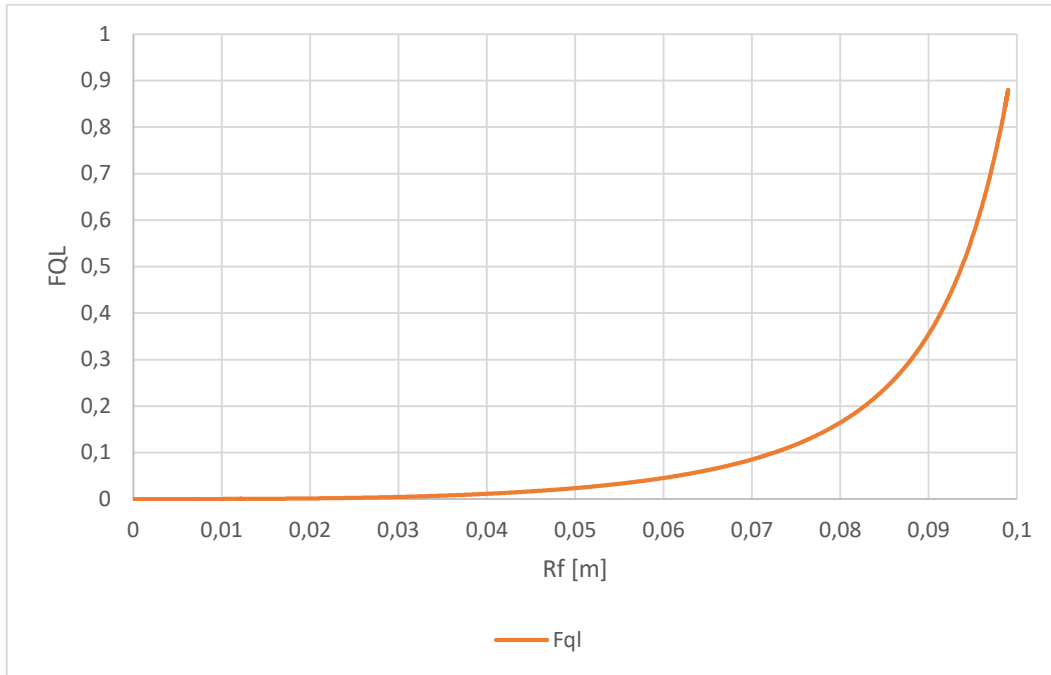


Figura 36: Evolución temporal modelo de la presión durante una deflagración laminar en una BCVC con condiciones iniciales: $P_{llenado}=5\text{bar}$ y $T_{sq}=360\text{K}$. [Iglesias, 2015, p. 109]



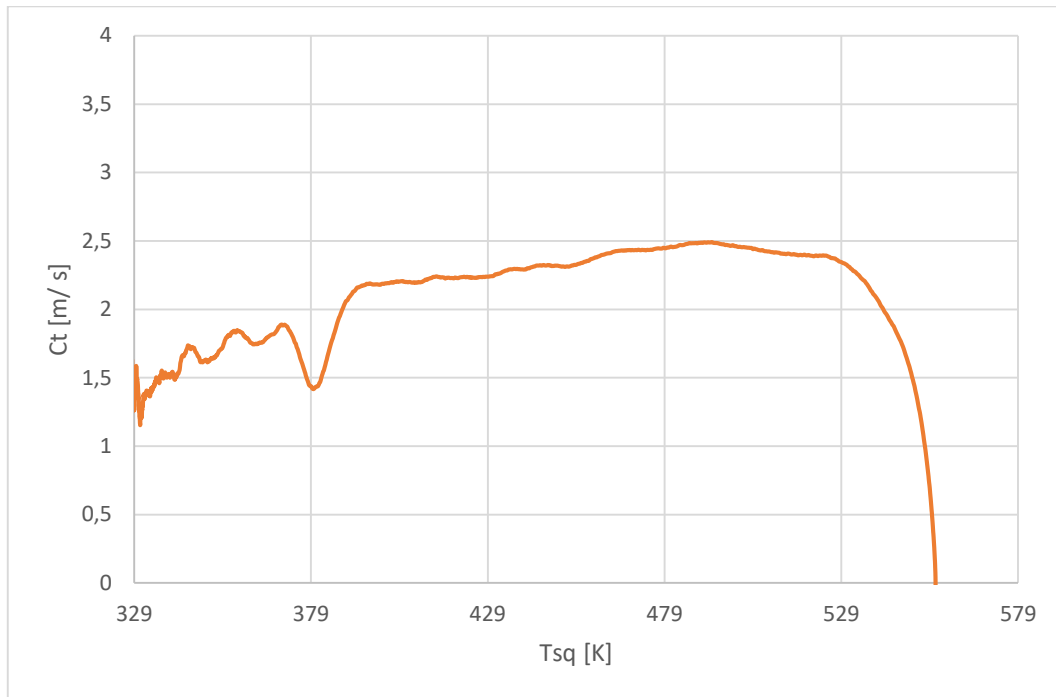
Representación 2: Temperatura de productos quemados en función de la temperatura de gases no quemados (Ensayo 2)

La representación 2, o curva de verificación, confirma que los resultados son válidos si el primer punto de la curva coincide con el valor de T_q y de T_{sq} introducido en las premisas del experimento. La representación muestra la evolución de ambas temperaturas en la combustión y como lógicamente aumentan a la par a medida que la deflagración avanza.



Representación 3: FQL en función del radio del frente de llama (Ensayo 2)

La representación 3, añade información al usuario sobre el proceso de encendido de una mezcla. La curva muestra como la fracción de calor liberado (FQL) es mayor a medida que el radio del frente de llama (R_f) aumenta. Esto es porque el área del frente de llama crece con el R_f , y por lo tanto al haber más superficie de contacto entre la zona de quemados y no quemados, el intercambio de calor es mayor. Nótese que el valor máximo de FQL es 1 y que el del R_f es 0,1 m, correspondiente al radio geométrico de la bomba.



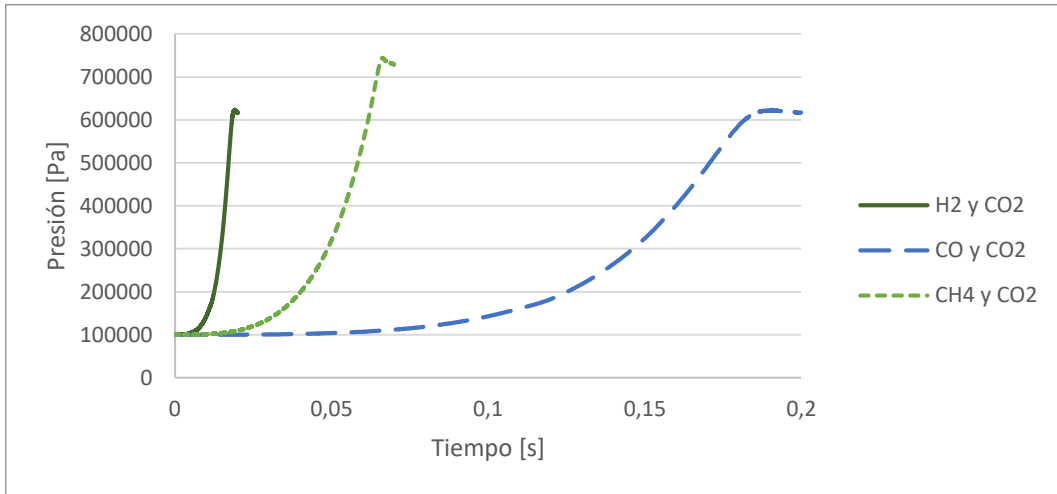
Representación 4: Velocidad de combustión laminar en función de la temperatura de los gases no quemados (Ensayo 2)

La representación 4, o curva de análisis, caracterizará los ensayos siendo esta el objetivo final de salida del modelo de diagnóstico. Se puede observar la evolución de la velocidad de combustión en función de la temperatura de los reactivos e inertes sin quemar. La temperatura inicial corresponde con la introducida en las premisas del ensayo. En el inicio de las combustiones se produce ruido en la señal, reflejado en la representación de la curva de C_t de todos los ensayos realizados. A modo de curiosidad, se puede ver como hay un pico descendente de la velocidad de combustión cuando la temperatura de los no quemados en este caso es de aproximadamente 379 K; esto ocurre en la mayoría de los ensayos realizados para este TFG a la temperatura correspondiente en cada caso.

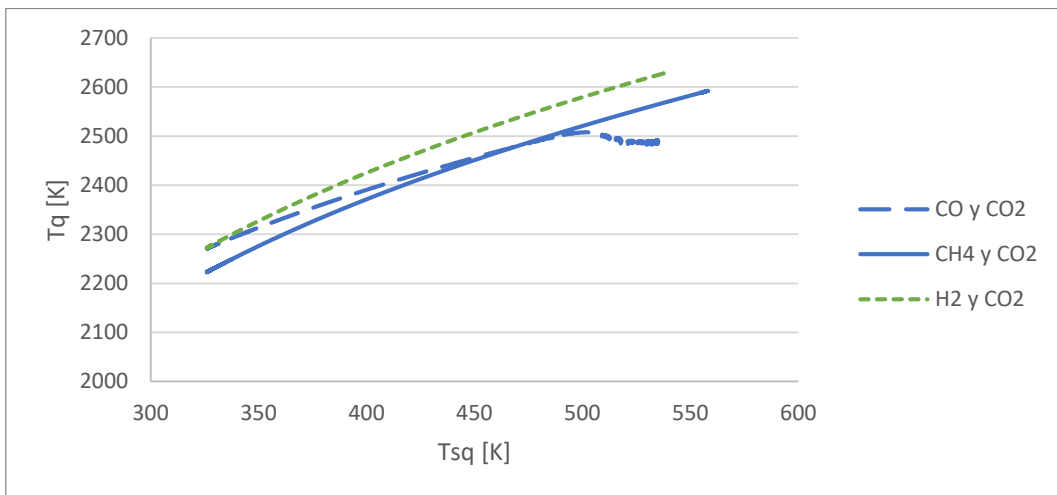
6.2.1. Comparación de combustibles

Con la comparación de los tres combustibles se va a poder estudiar la influencia de cada gas inerte en las representaciones de la presión, de las temperaturas y de la velocidad de combustión laminar.

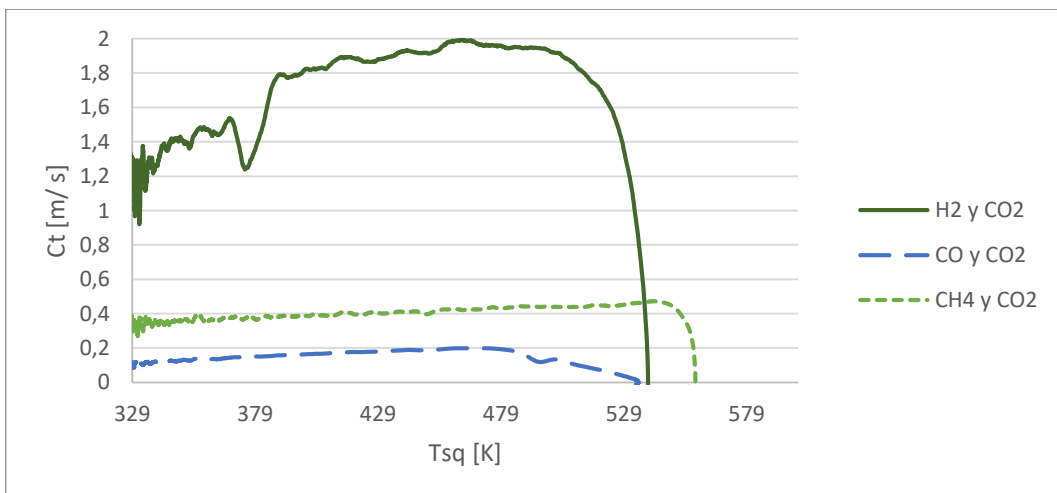
6.2.1.1. Combustibles con dióxido de carbono



Representación 5: Presión en función del tiempo (Ensayos 1,4 y 7)



Representación 6: T_q en función de T_{sq} (Ensayos 1,4 y 7)



Representación 7: C_t en función de T_{sq} (Ensayos 1,4 y 7)

Comenzando con el análisis de las representaciones, se puede distinguir claramente el dominio del combustible hidrógeno en cuanto a tiempo, temperatura y rapidez. En la gráfica 5, se ve como claramente la combustión del hidrógeno se produce en mucho menos tiempo que la de metano o la de monóxido de carbono. En la gráfica 7 se asienta la afirmación anterior, ya que muestra un claro despunte de la velocidad de combustión sobre los demás combustibles. Ocurre totalmente lo contrario con la deflagración del monóxido de carbono, esta se aprecia mucho más perezosa que las otras dos y deja en evidencia su baja velocidad de combustión.

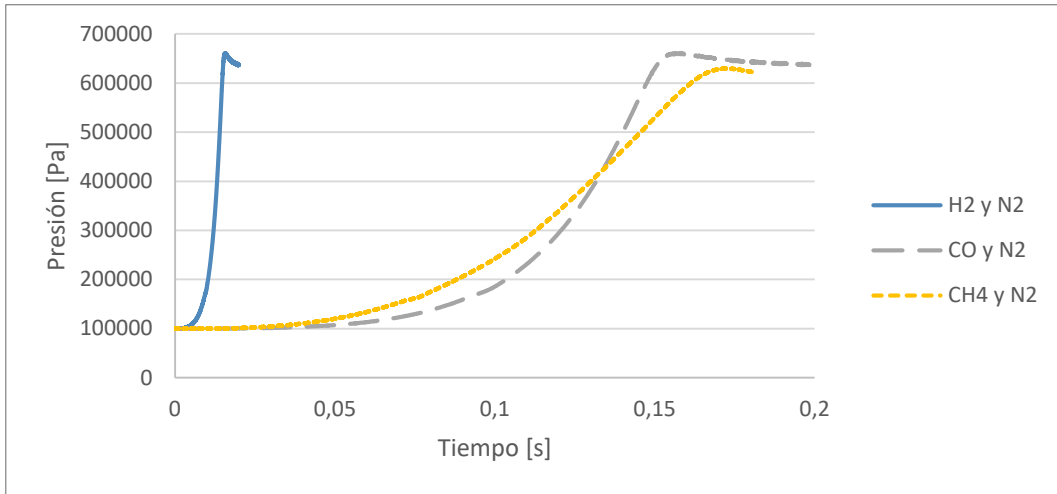
En lo que se refiere a las temperaturas, se ve como T_{sq} es la misma en los tres casos (329 K), y cómo la única T_q diferente es la del metano. Esto es por lo que se comentó anteriormente en el apartado de plan de ensayos.

En resumen y a la vista de los resultados, se concluye que la velocidad de combustión máxima del hidrógeno cuadruplica el valor de la inmediatamente anterior; la del metano, cuando el gas inerte es el dióxido de carbono.

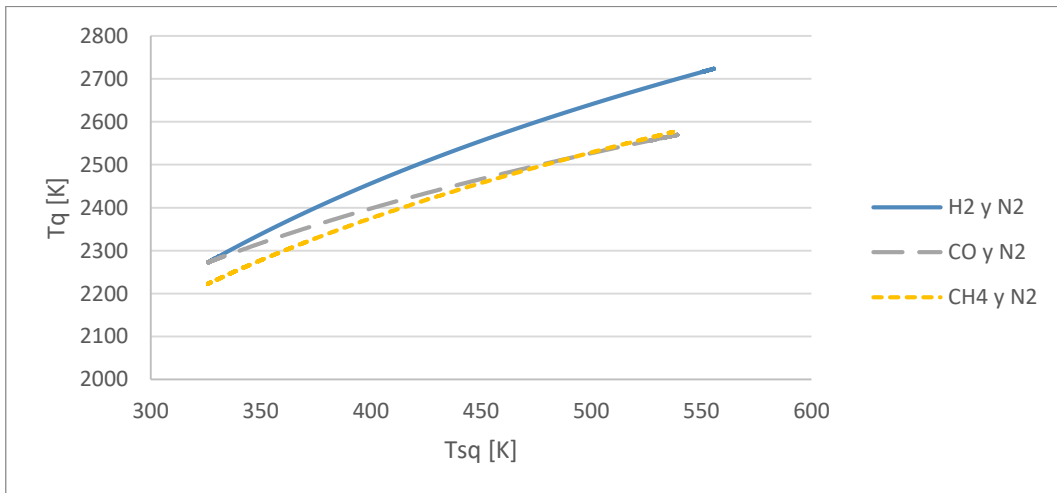
A modo de cuadro resumen se van a anotar los valores de C_t , T_q y P máximos de cada ensayo:

Nombre ensayo	1	4	7
“Mezcla”	H2 y CO2	CO y CO2	CH4 y CO2
C_t máx [m/s]	1,98	0,19	0,46
T_q máx [K]	2627	2522	2591
P máx [Pa]	618096	618371	737178

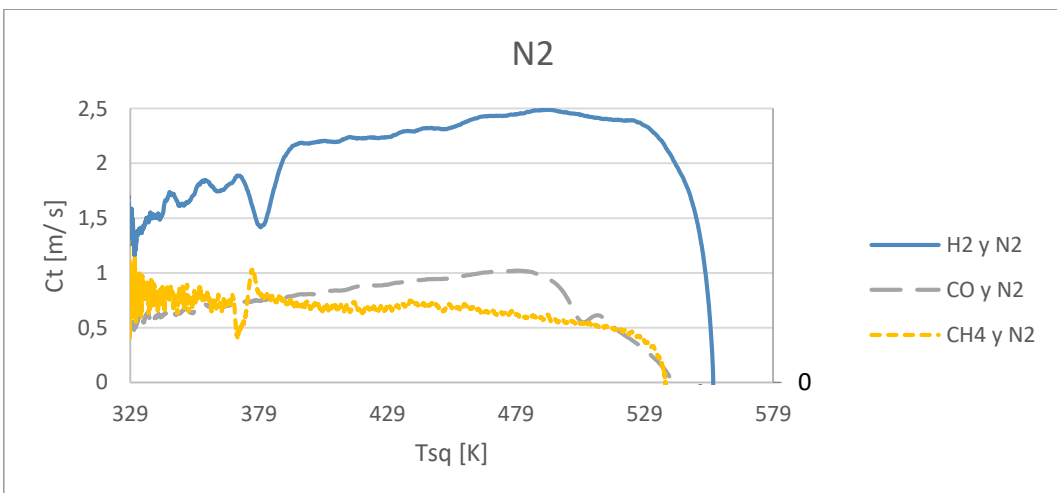
6.2.1.2. Combustibles con nitrógeno



Representación 8: Presión en función del tiempo (Ensayos 2,5 y 8)



Representación 9: T_q en función de T_{sq} (Ensayos 2,5 y 8)



Representación 10: C_t en función de T_{sq} (Ensayos 2,5 y 8)

En cuanto a las representaciones gráficas de los ensayos de los combustibles con el gas inerte N_2 , se sigue demostrando la rapidez de la deflagración cuando en la mezcla está presente el hidrógeno. Se puede decir también que la combustión del metano es en general más lenta que la del monóxido de carbono, ya que a la vista de la representación 8, se ve como la curva del ensayo con metano presenta menos pendiente en su curva y aparte tarda más en llegar a su punto máximo, siendo este además inferior al del otro ensayo.

Referente a la gráfica de temperaturas se tiene la particularidad de la T_{sq} del ensayo con metano cómo en el apartado anterior ($T_{sq} = 1950\text{ °C}$)

En lo que compete a la representación 10, cabe destacar que se ha utilizado un segundo eje vertical o de ordenadas para observar más detalladamente la evolución de la C_t de los combustibles CO y CH_4 .

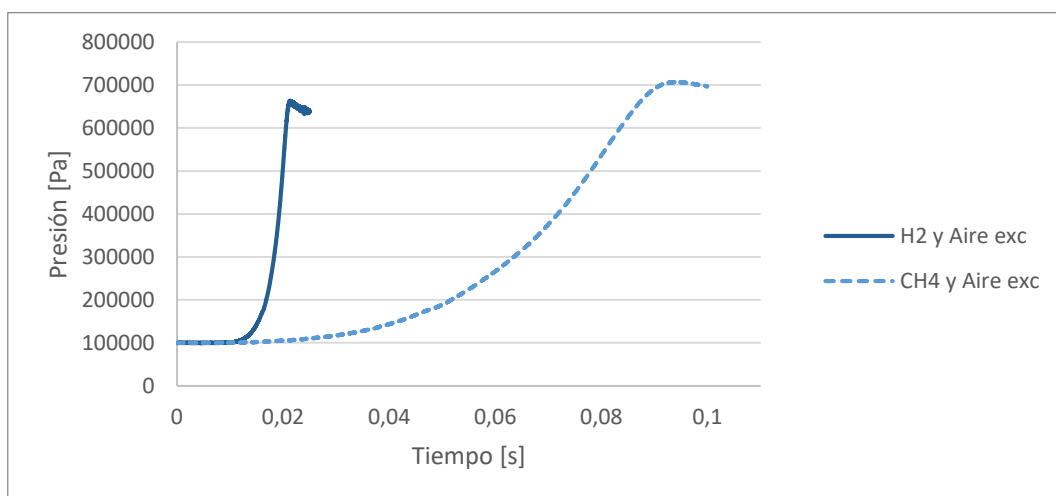
A modo de cuadro resumen se han anotado los valores máximos de la velocidad de combustión laminar a continuación:

En lo que respecta a los combustibles ensayados con nitrógeno;

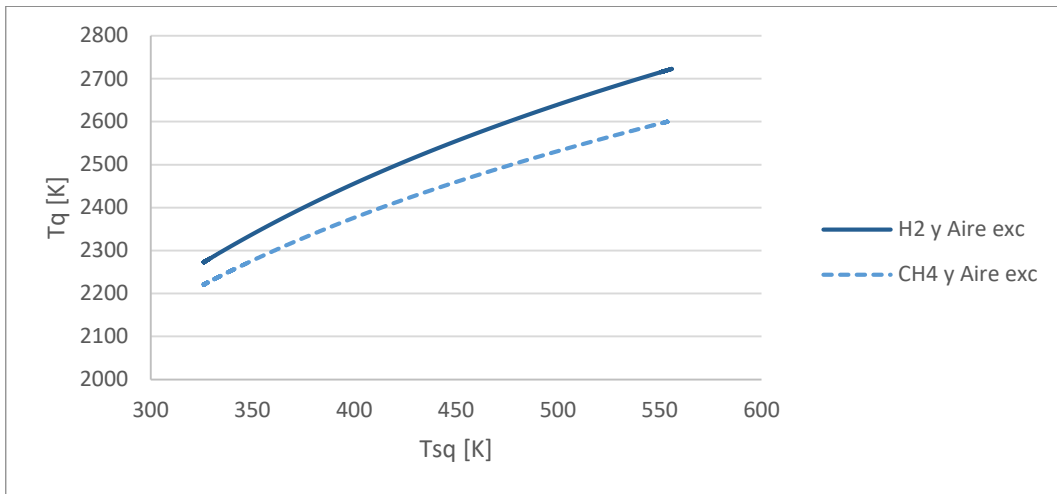
Nombre ensayo	2	5	8
“Mezcla”	H2 y N2	CO y N2	CH4 y N2
C_t máx [m/s]	2,48	0,2	0,18
T_q máx [K]	2722	2566	2575
P máx [Pa]	649832	655994	625597

De estos valores se obtiene que la C_t máxima sea la resultante del ensayo con H_2 , siendo aproximadamente doce veces superior a las que le preceden.

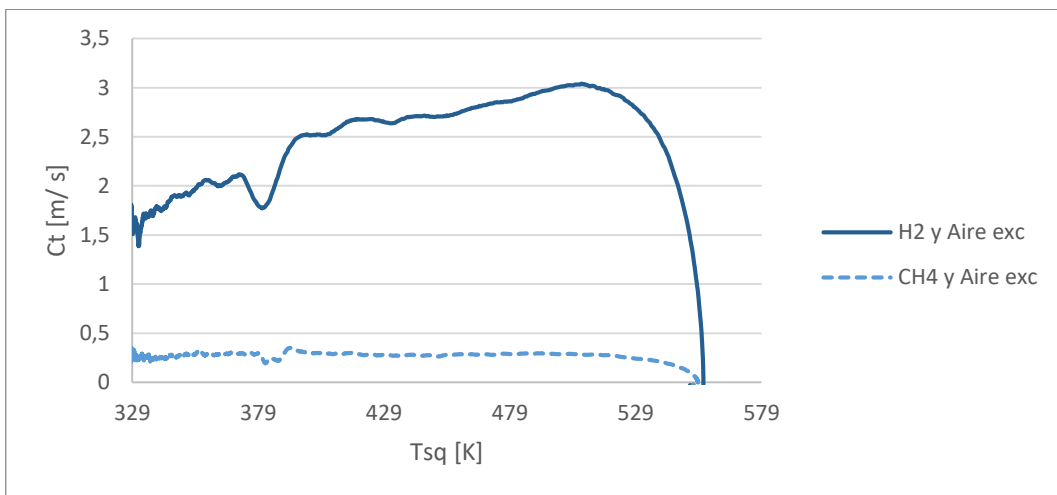
6.2.1.3. Combustibles con aire en exceso



Representación 11: Presión en función del tiempo (Ensayos 3 y 9)



Representación 12: T_q en función de T_{sq} (Ensayos 3 y 9)



Representación 13: C_t en función de T_{sq} (Ensayos 3 y 9)

En lo que respecta a estos dos ensayos, en los que se utiliza aire en exceso como gas inerte, es reseñable nuevamente la explosividad del hidrógeno como combustible por encima de la del metano.

Ante los resultados mostrados con la representación 11, el comportamiento del hidrógeno se vuelve a ver rápido ante la ignición (pendiente de la curva mayor). La representación del ensayo con metano tiene una pendiente más suave, con una mayor presión máxima en un tiempo más amplio.

Se podría concluir que el fenómeno de una combustión lenta influye en la planitud de la curva de C_t del metano, donde a la vista de la representación 13 se puede ver cómo la línea de C_t frente a la T_{sq} es mucho más constante que la de hidrógeno, la cual tiene variaciones más acusadas.

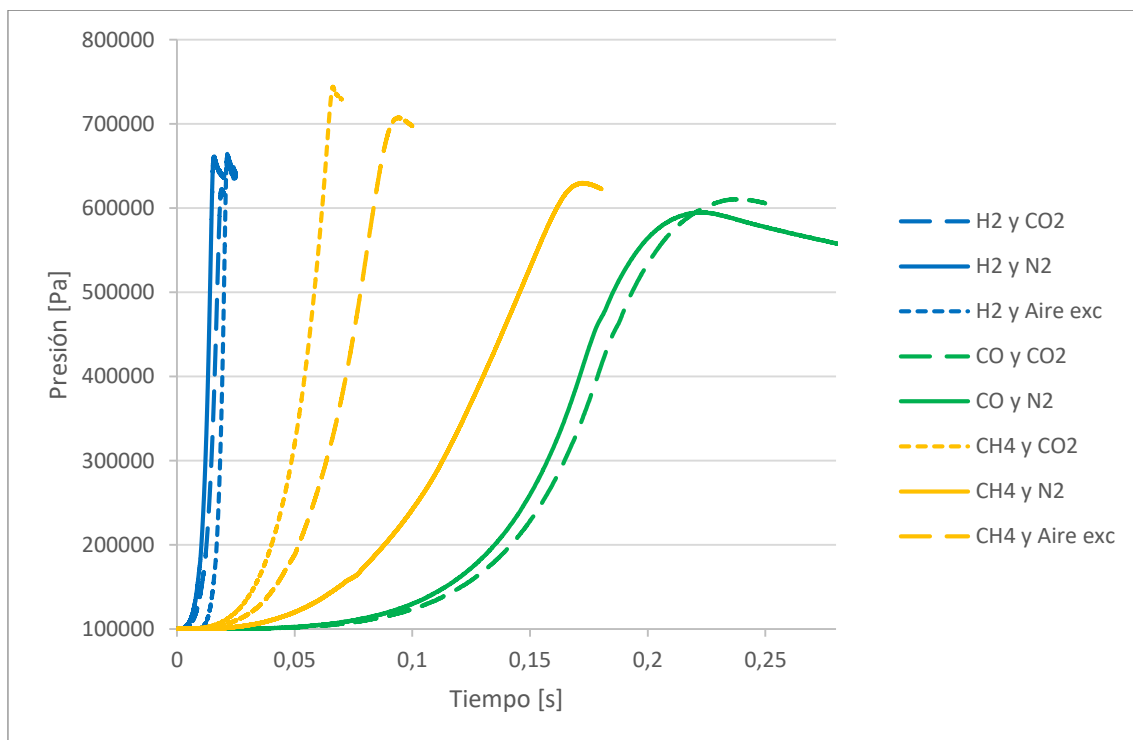
Cuadro resumen de valores máximos de los ensayos con gas inerte “aire en exceso”:

Nombre ensayo	2	5	8
“Mezcla”	H2 y Aire exc	CO y Aire exc	CH4 y Aire exc
C_t máx [m/s]	3,03	NA	0,35
T_q máx [K]	2718	NA	2594
P máx [Pa]	653052	NA	697897

6.2.2. Comparación de series

Seguidamente, se va a hacer un análisis de todas las curvas de gas- inerte en las tres variables: Presión, temperatura de quemados y velocidad de combustión laminar. Con esto se estará en condiciones de obtener las conclusiones oportunas habiendo relacionado todas las curvas de los ensayos.

6.2.2.1. Registro temporal de presión



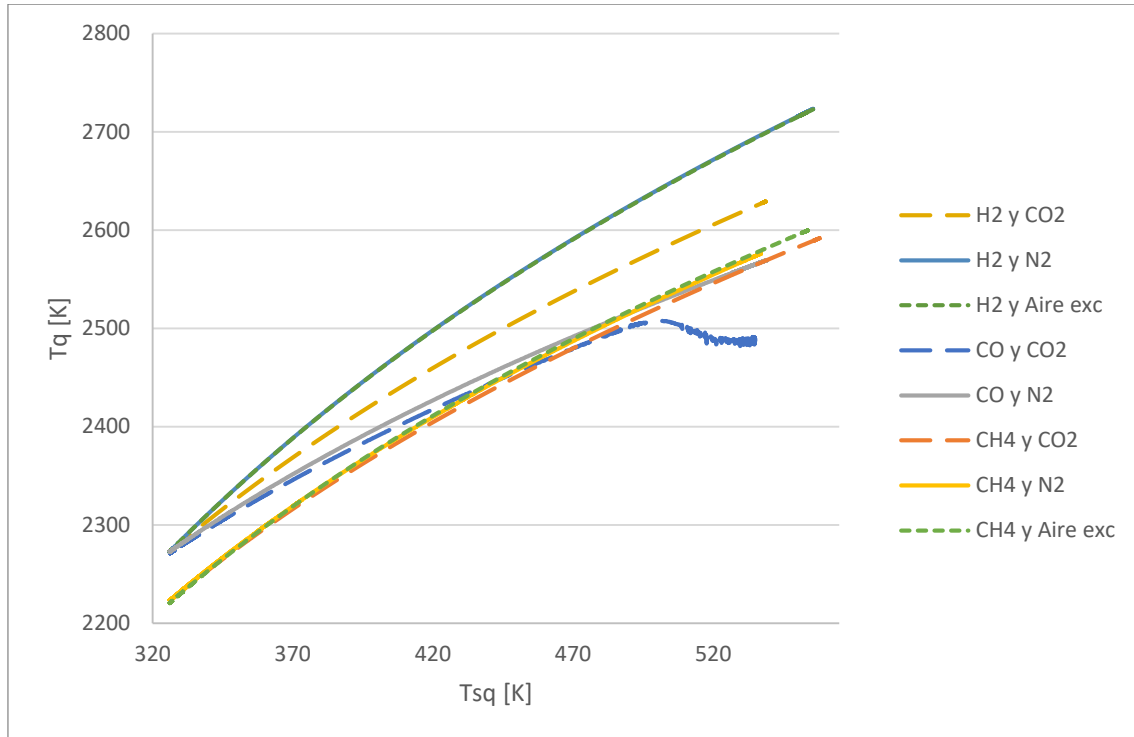
Representación 14: Registro temporal de la presión de todos los ensayos

En cuanto a la representación 14 se puede concluir que:

- La curva de registro temporal de la presión del ensayo de CH₄ y CO₂ es la que alcanza el mayor valor de presión.

- El ensayo con H_2 y N_2 es el más rápido y explosivo.
- El ensayo de CO y CO_2 es el más lento, ya que ocurre en mayor tiempo.

6.2.2.2. Temperatura de productos quemados en función de la temperatura de los gases no quemados

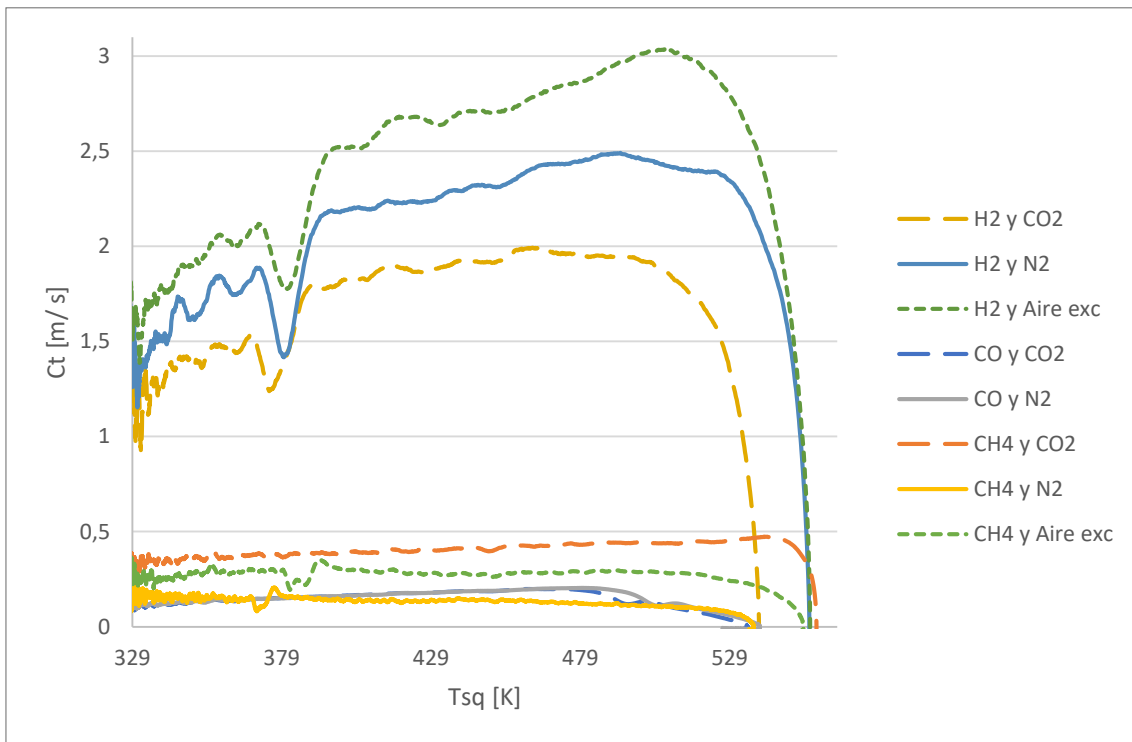


Representación 15: Representación de T_q en función de T_{sq} en todos los ensayos

En lo que respecta a la representación 15:

- El ensayo de H_2 y N_2 , es el más energético ya que para el mismo punto de T_{sq} le corresponde una T_q mayor que la de los restantes.
- Se ha producido ruido a partir de 495 K de T_{sq} en la señal del ensayo de CO y CO_2

6.2.2.3. Velocidad de combustión laminar en función de la temperatura de los gases no quemados



Representación 16: Representación de C_t en función de T_{sq} para todos los ensayos

Como muestra la representación 16 se puede sacar las siguientes conclusiones:

- La curva de C_t del ensayo H_2 y Aire en exceso presenta el valor máximo de la C_t de todos los ensayos.
- Los ensayos con el hidrógeno son los que mayor C_t presentan durante toda la combustión.

A modo de conclusión final y a la vista de los resultados de las curvas de la C_t se está en condiciones de afirmar que el combustible hidrógeno, sería el más apropiado si se busca un combustible alternativo a los actuales.

Capítulo 7: **CONCLUSIONES Y** **TRABAJOS FUTUROS**

7. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

7.1. Conclusiones

Como conclusión de los resultados se puede decir que ha quedado bastante claro que la combustión del hidrógeno es la más rápida independientemente del gas inerte que se le introduzca. Los otros dos combustibles, metano y monóxido de carbono han quedado en evidencia delante del hidrógeno. No existe mucha diferencia en la combustión entre estos dos combustibles, pero si se puede estar en condiciones de afirmar que la combustión del metano, en general, es más veloz que la del monóxido de carbono, pero mucho más lenta que la del hidrógeno independientemente del gas inerte utilizado en el ensayo.

Todos los objetivos planteados al principio de este TFG han quedado cubiertos, en mayor o menor medida tanto a lo largo de la realización de los ensayos cómo a la hora de la redacción y documentación para escribir este proyecto.

- ✓ Se ha creado un método de cálculo general, mediante la realización de una hoja de Excel, que incorporándola a la nueva metodología de ensayo hacen que los experimentos futuros que se lleven a cabo en la instalación sean más simples.
- ✓ Se ha hecho uso de la instalación del laboratorio con el fin de realizar medidas sobre la velocidad de combustión de diferentes mezclas combustibles.
- ✓ Se ha trabajado con el modelo de diagnóstico y se han pulido detalles de este, que sin su uso durante los ensayos no hubiesen podido solucionarse.
- ✓ Se han dado resultados válidos, a partir del registro de la presión, de la velocidad de combustión laminar de diferentes mezclas de combustibles e inertes.

Aparte de haber conseguido todos los objetivos anteriores, que se podrían definir objetivos propios del TFG, he adquirido otros personales entre los que destacan: El trabajo de aprovisionamiento de documentos, libros y tesis para la realización de este proyecto, la labor de retomar y aplicar aspectos relacionados con asignaturas de la carrera, desde química, matemáticas o máquinas térmicas entre otras y sobre todo haber cubierto el objetivo primordial, aprender a la vez que aportar mi granito de arena para los futuros proyectos que prosigan con el tema.

7.2. Trabajos futuros

A partir de las pautas, metodología y del modelo diagnóstico empleados en este TFG, es previsible que se pueda pensar en ensayos con los mismos tipos de combustibles, pero variando premisas y proporciones con respecto a las aquí presentes. Cabe la posibilidad también de que se empleen otro tipo de mezclas y combustibles, ya que la instalación también está preparada para el uso de combustibles líquidos. En definitiva, existen muchos caminos hacia los que dirigirse haciendo uso de este documento y de la instalación disponible, siempre con el mismo objetivo: hacer una medida de la velocidad de combustión laminar de todos los ensayos que se propongan.

Capítulo 8: **ANEXOS**

8. ANEXOS

8.1. Macro para aplicar el método de la bisección

Las siguientes líneas de código muestran como es aplicado en la “Macro Calcula_Tad_con_equilibrio” de la hoja de Excel el método de la bisección para el cálculo de equilibrio químico:

```
Sub Calcula_Tad_con_equilibrio()  
,  
,  
' Macro2 Macro  
,  
,  
  
Application.ScreenUpdating = False  
  
Do While Abs(Range("M33").Value) > 0.0000000001 Or Abs(Range("M21").Value) >  
0.0000000001  
  
Range("G22:G23").Select  
  
Selection.Copy  
  
Range("H22").Select  
  
Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks _  
:=False, Transpose:=False  
  
Do While Abs(Range("M21").Value) > 0.0000000001  
  
Range("M22:M23").Select  
  
Application.CutCopyMode = False  
  
Selection.Copy  
  
Range("H22").Select  
  
Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks _  
:=False, Transpose:=False
```

Loop

Range("M30").Select

Application.CutCopyMode = False

Selection.Copy

Range("C38").Select

Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks _

:=False, Transpose:=False

Loop

End Sub

Dónde las celdas presentes se corresponden con las variables de la tabla:

M33	err
M21	error
H22	a_i
H23	b_i
G22	a_1
G23	b_1
M22	a_{i-1}
M23	b_{i-1}
M30	$X_{\text{inertes } i}$
C38	$X_{\text{inertes } i-1}$

8.2. Macro para aplicar el método de las presiones parciales

Las siguientes líneas de código de la “Macro Ordenar” muestran cómo se aplica el comando de orden a la composición de la mezcla, para que el método de las presiones parciales sea válido. Ordena de menor a mayor los valores de la columna I (I39:I44), que contiene los valores de cada compuesto de la mezcla, sin perder la relación con el nombre insertado la columna H (H39:I44) y los pega a partir de la celda K39.

Sub Ordenar()

,

' Ordenar Macro

,

,

Range("H39:I44").Select

Application.CutCopyMode = False

Selection.Copy

Range("K39").Select

Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks _

:=False, Transpose:=False

Application.CutCopyMode = False

ActiveWorkbook.Worksheets("Equilibrio").Sort.SortFields.Clear

ActiveWorkbook.Worksheets("Equilibrio").Sort.SortFields.Add Key:=Range(_

"L39:L44"), SortOn:=xlSortOnValues, Order:=xlAscending, DataOption:= _

xlSortNormal

With ActiveWorkbook.Worksheets("Equilibrio").Sort

.SetRange Range("K39:L44")

.Header = xlGuess

.MatchCase = False

.Orientation = xlTopToBottom

.SortMethod = xlPinYin

.Apply

End With

End Sub

Donde las celdas se corresponden:

H2	H39
CO	H40
CH4	H41
Aire	H42
N2	H43
CO2	H44
VALOR H2	I39
VALOR CO	I40
VALOR CH4	I41
VALOR Aire	I42
VALOR N2	I43
VALOR CO2	I44

Capítulo 9: **REFERENCIAS**

9. REFERENCIAS

- Lafuente, A. (2008). *Metodología para el diagnóstico de la velocidad de combustión laminar de mezclas de gases combustibles a partir de la medida de la presión instantánea en una bomba de combustión a volumen constante* (Tesis Doctoral). Universidad de Valladolid, Valladolid, España.
- Reyes, M. (2008). *Caracterización de la combustión y el autoencendido de combustibles líquidos en mezclas homogéneas para su uso en motores térmicos en modo HCCI* (Tesis Doctoral). Universidad de Valladolid, Valladolid, España.
- Iglesias, D. (2015). *Caracterización de mezclas de combustibles para motores térmicos en una bomba de combustión a volumen constante* (Tesis Doctoral). Universidad de Valladolid, Valladolid, España.
- Neher, D. (2017). *Miller Cycle and exhaust gas recirculation for a naturally aspirated lean burn gas engine* (Doctoral Thesis). University of Valladolid, Valladolid, Spain.
- Morán, M. J. y Shapiro, H. N. (2012). *Fundamentos de termodinámica técnica*. Barcelona: Reverté.
- Payri, F. y Desantes, J.M. (2011). *Motores de combustión interna alternativos*. Valencia: Reverté.
- Álvarez, J. A. y Callejón, I. (2005). *Motores alternativos de combustión interna*. Barcelona: Edicions UPC.
- NIST (2017). *Datos del NIST*. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>